《化学哲学基础》编委会

序

化学哲学是指以化学为研究对象的哲学。它是科学哲学的一个分支。国外科学哲学流派很多，我们要以马克思主义为指导，吸取其中合理的部分，扬弃、批判其中的谬误，逐步形成以马克思主义为指导的化学哲学。换句话说，我们要研究的化学哲学就是“以化学为研究对象的自然辩证法”。

化学哲学现在还处于萌芽阶段，它的内容、结构和体系尚未定型。初步看来，它应研究与探讨下列四个基本问题：

第一，化学哲学的本体论问题。包括诸如对化学科学的逻辑结构与经验内容的分析，化学运动形式的定义，化学运动的主要矛盾，化学运动与其它运动形式的关系，化学研究的对象，化学的分类，化学与其它科学的关系，化学边缘学科的开拓等内容。

第二，化学哲学的认识论问题。大体包括两方面的内容：（1）化学知识的认识、积累、储存和运筹。诸如化学史的哲学分析，化学发展的规律，化学发展对哲学的影响，化学发展与化学家的哲学思想，化学概念和理论的演化等。（2）化学知识的传递。诸如化学人才的培养、教育、开发和管理等问题。

第三，化学科学的方法论问题。包括化学研究的一般方法，化学的基本范畴，著名化学家的研究方法，方法论的研究对化学发展的意义和作用等内容。

第四，化学与技术革命和社会进化的关系问题。例如化学与化学哲学在新技术革命中的地位和作用，“信息时代”中化学发展的特点、前景、作用和意义，化学在我国四化建设中的地位和作用等。

中国自然辩证法研究会化学化工专业组为推动化学哲学的研究，促进四化建设，先后召开过几次全国性的化学化工辩证法学术讨论会，提出了数百篇有关化学哲学方面的论文。为了更好地进行学术交流，促进化学化工辩证法研究工作的开展，专业组接受会员们的建议，组织了《化学哲学基础》一书的编辑出版，在中国自然辩证法研究会和科学出版社的支持下，作了大量工作。他们希望我们三人担任主编，尽管我们时间有限，不可能抽出更多的精力与同志们共同研讨，但鉴于这是一件有意义的工作，还是接受了这一委托。在研究会、专业组和编委会、出版社各方面同志的共同努力下，历时两年，《化学哲学基础》终于能够与读者见面了。

由于化学哲学还是处于襁褓中的一门学科，据我们所知，国内外类似的著作甚少。因此，这本由几十位哲学和化学工作者共同编撰的《化学哲学基础》，还只能说是抛砖引玉之作，目的在于为化学哲学的发展作些准备工作。全书编辑体例和框架尚不够严谨，许多观点也不可能是统一的，其中难免有一些错误和不当之处，诚恳希望读者批评指正。

唐敖庆　卢嘉锡　徐光宪

1984年8月

目　　录

一 化学哲学概论

（一）化学哲学的对象、内容和意义

研究和探讨化学中的哲学问题是一项比较艰巨的工作，它不仅需要哲学上的准备，而且还需要对化学科学的历史和现状有所了解。这是一个相当广阔的领域，同时又有相当的深度。历史上的化学文献如此之多，当代的化学进展又十分迅速，因此要对化学科学的成果作出正确的哲学概括，并对结论所依据的科学事实作出判断，所要求的知识越来越多，所要求的哲学修养也越来越高。

这种状况，一方面表明深入开展化学哲学研究必须付出极大的劳动；另方面也可望通过辛勤耕耘，使化学哲学的研究成果会有助于促进化学和哲学的发展，并加强化学工作者和哲学工作者的联盟。

1.化学哲学研究的对象和内容

化学哲学是以化学领域中具有世界观与方法论意义的一般理论问题为主要研究对象，该一般理论问题主要涉及以下若干方面：(1)探讨化学研究的对象、特点、地位和作用；（2）揭示化学科学发展的规律性和预见化学发展的方向与趋势；(3)阐发物质化学运动本身具有的辩证内容；(4)讨论化学研究中的方法论和认识论问题；(5)分析化学取得的成果和重要化学家所作贡献的哲学意义及现实意义；(6)研究化学和哲学的辩证关系及其对化学、哲学发展的作用等。

作为化学哲学研究内容的具体反映，即化学哲学问题的研究课题，目前大体主要有下列十项：

化学研究的方法论

这是化学哲学问题中研究比较广泛的领域，其中对于实验方法、模型方法及假说方法在化学研究中的作用和特点的分析占有突出的地位。化学方法论研究中，关于现代分子结构理论中的方法论问题日益受到重视。价键理论、分子轨道理论和配位场理论是现代分子结构理论的三大流派。当前如何以唯物辩证法为指导，从化学结构理论本身的特点出发，注意吸取化学史上的经验教训，科学地把分子结构理论研究中的方法论问题总结出来有着重要的现实意义，同时对全面地评价三大流派也是十分有益的。

此外，值得注意的是，在科研面向经济建设的方针指引下，近几年来，关于化工生产中的方法论及化工技术开发中的方法论问题也日益受到关注。

关于化学史的哲学分析①

这方面的研究工作大致可以分为两类：一类是以化学史为基本线索，以哲学思想作

① 张嘉同："苏联化学哲学问题研究情况简介"，《化学通报》1982年1期，62页。

指导分析化学发展的规律性，从中引出认识论和方法论方面的结论，其特点是以史为主，史中有论；另一类是以对化学史实的具体分析来论证某种哲学观点，说明某种规律或原理，其特点是以论为主，论中有史。这两类研究工作开展较为普遍，但需要提高水平，开创新局面。目前有一个动向值得重视，那就是在扎实的对化学史料考察基础上，全面而又深入地开展化学思想史的研究及教学工作。

化学革命问题的探讨

“化学革命”一般是指化学基本理论观点与基本研究方法的变革，而不是所有具体化学科学内容的重建。探讨历史上的化学革命和现代化学革命，对于正确认识化学发展的规律性，以及化学科学自身发展中的继承与革新的辩证关系是颇为有益的；同时对于认识整个自然科学发展的规律性和理解科学革命的思想也是很有意义的①。另一方面，应看到关于化学革命又是化学哲学研究的传统课题，面临着一个推陈出新的问题。总的来说，对于历史上的化学革命已经开展了相当多的研究工作，而关于现代化学革命的探讨，一般还缺乏具体明确的见解，这方面的研究工作目前正在逐步深入展开。

化学和其它学科的关系

化学和物理、生物、天文、地理、数学等基础学科有着普遍的联系，其中尤以化学和物理学、生物学的关系更为密切。因此，无论从历史和现实来看，还是从国内外情况来看，这方面的哲学论争都比较活跃，有时表现得相当激烈。

关于化学和物理学的关系方面，无论国内还是国外，都存在着把化学归结为物理学的一部分的观点。近年来，不少研究者从分析化学学科研究对象的特点，化学学科的地位、作用，以及化学运动与物理运动形式间的关系等方面，直接或间接地对这种观点表示了不同意见。至于生命运动的规律能不能归结为化学、物理运动规律；生物学可否还原为化学、物理学，这在科学史上是个长期争论的问题。从哲学上看，它涉及的面较广，既与机械论和活力论之争有关，也跟如何全面地认识高级运动形态与低级运动形态的关系有关。这个在辩证唯物主义看来本来已经明确的问题，现在由于分子生物学的发展、生命起源的化学途径的逐步被证实，又在新的科学背景下重新被提了出来②。

关于“共振论”的讨论

苏联在四十年代末、五十年代初，在化学领域曾批判了鲍林的共振理论，认为共振论在哲学上是唯心主义和机械论的，在量子力学上是没有根据的，在化学实践上是没有用处的。五十年代初期，由于在指导思想及方法上受苏联影响，我国化学哲学领域也开展了对共振论的批评和讨论；十年动乱期间又再批共振论。近几年内又进行了重新评价共振论的讨论③。因此，如何历史地、全面地评价共振论，并从共振论的讨论中引出必要的历史教训来，这对于今后化学哲学研究工作的正常而又深入地开展无疑是有现实意义的。

---

① T.S.库恩，《科学革命的结构》，上海科学技术出版社，1980年，5页，110页。
② 胡文耕，《分子生物学中的哲学问题》，天津人民出版社，1982年，71页。
③ 潘道皑、熊汉绪，“有关共振论讨论的历史概况”，《化学通报》1983年4期，56页。

关于化学运动基本矛盾问题的探讨

化学运动的基本矛盾问题是化学哲学研究的一个基本理论问题。我国哲学界及部分自然辩证法工作者中存在着两种带有一定代表性的观点：一种观点认为“化合和分解”是化学运动的基本矛盾，另一种观点则认为“化学的吸引和排斥作用”是化学运动的基本矛盾。深入研究和探讨这个问题意义是重大的，它直接影响着其它有关的化学哲学问题的立论根据。

为了有利于这种探讨的深入，应该做到既不回避革命导师的有关论述，又不回避化学实践中提出的尖锐矛盾。对化学运动基本矛盾问题的分析，应该坚持从化学的实际出发，并在此基础上作出科学的哲学概括来，而不是从单纯的概念、定义或个别论断出发，作推论或引伸并由此作出结论。

关于化学运动辩证内容的研究

化学运动的辩证内容是相当丰富的，诸如：性能和组成、结构，化学平衡和化学运动、反应的可逆与不可逆，氧化和还原、元素和系统；化学运动中的量变与质变、能量守恒与转化等。但要把这些辩证内容科学地阐发出来，则需要作坚持不懈的努力。

对化学运动辩证内容的阐发，必须紧密联系化学科学不断发展的实际，同时也要重视以唯物辩证法一般原理作指导。只有两者的有机结合，才能使我们获得对化学运动辩证内容的全面认识，进而有助于对化学运动基本矛盾的深入探讨。这是一项基础性的化学哲学研究课题，值得引起足够的重视。

现代化学的科学分类

现代化学的发展使得化学学科的内容高度分化又高度综合，化学与其它学科的渗透交叉也日益显著。因此对化学的分支学科进行新的科学分类已经成为必要，关键是如何建立起能够全面反映现代化学特点与趋势的分类标准，在这方面目前已有了多种尝试①。这些新的分类方法有个共同点，就是都打破了传统的无机、有机的界限，采用了合成和分析的分类，强调了物质静态的结构性能和动态的化学动力学；也都把微观理论基础的理论化学（即量子化学）提到化学一个分支学科的地位。从某种意义上可以说，这是从化学问题的本质来划分现代化学分支学科的一种方法。

总的说来，现代化学的科学分类还是一个较新的课题，需要化学工作者和自然辩证法工作者共同深入研究，使之有利于推动化学前沿领域的研究，有利于化学研究的规划与组织，有利于化学教育体制的改革及专业的设置。

现代化学发展所提出的哲学问题

这可以说是化学哲学研究的新课题，大体包括两个方面：其一，通过对现代化学发展特点（从宏观向微观、从定性向定量、从静态向动态、从描述性向推理性过渡）的分析，探讨现代化学发展的本质特征和趋势。其二，立足现代化学发展的前沿（诸如元素

① 蒋明谦：“当代化学的发展趋势”，《化学通报》，1979年8期，1页。

的起源与演化，化学合成与分子设计，生命起源和化学进化，化学动力学与激光技术，量子力学和化学，化学振荡与耗散结构等），探讨有关丰富与发展辩证唯物主义自然观、科学观及科学方法论方面的哲学问题。如今，这些化学哲学研究的新课题已越来越引起人们的关注和兴趣。

化学人才开发和培养中的哲学问题

要使化学化工发展适应四化建设的需要，化学人才的开发和培养是个关键。而要使化学人才辈出，实现化学化工教育体制的改革，和化学人才知识结构的调整及智力的开发则是很重要的。为此需要在思想上和方法上正确处理好各种辩证关系，诸如：化学人才的数量和质量、知识结构与能力，化学化工的教学和科研，化学科研中的应用研究和基础研究，化学教学中的专业设置与基础课程等。探讨这一系列涉及认识论、方法论又关联着人才培养的政策、方针及规划的课题，是很有现实意义的。

以上所述，仅是化学哲学研究内容的一个概况。总的说来，化学哲学研究就现状而言，比较侧重于化学的历史，化学的概念与理论的哲学分析。近年来，化学方法论方面的研究内容显著增长；对于现代化学发展前沿中的哲学问题的探讨日益受到重视。

2. 化学哲学研究的意义

研究化学哲学的意义是多方面的：

加深对化学基本概念、基本理论的理解

通过对化学史的哲学分析，化学思想史和化学方法论的研究，可以比较系统而又全面地了解化学基本概念的由来及演变，化学基本理论的形成与发展。一方面认识到化学概念和基本理论都是实践的产物：随着化学实践的不断发展，化学概念的内涵和外延也在不断地发生变化，并得到补充和修正；任何一个化学理论也只能是相对完成的化学知识体系，它们同样在化学实践的推动下不断深化，而不是凝固不变、停留在一个水平上。另一方面，还可以认识到，化学概念和化学基本理论不仅是实践发展的产物，同时也是抽象思维的结果，它们都是经过反复的科学抽象而逐步形成的。作为科学抽象结果的化学概念，在形式上是抽象的、主观的，但在内容上则是具体的、客观的，有助于人们去把握物质化学运动的本质与规律；而作为化学知识体系的化学理论，就是由这些化学概念、以及跟这些概念相应的化学基本定律，还有用逻辑推理得到的结论这三者的统一所构成的。这种经过实践检验的化学理论，总是在一定范围内反映了物质化学运动的客观真理性，然而它又总是相对完成的东西。在化学实践的推动下，需要不断地重做理论的概括工作，即重新从现象的总和（包括新的化学现象）中抽取逻辑的出发点，并借助综合把具体在思维中复制出来。总之，了解和认识以上有关化学基本概念和基本理论形成发展的规律性，无疑会有助于我们加深对化学基本概念和基本理论的理解。

提高从事化学实践的主观能动性

通过对历史上化学革命和现代化学特点与趋势的分析，可以使我们具体而深刻地认识到："化学的发展是按辩证法的规律进行的。""我们现在的理论并不是教条，而是

按辩证法的规律不断变化的。”① 这样有助于把握化学发展的规律性和方向，更自觉地处理继承和革新的关系，努力按化学科学自身的发展规律办事。同时，通过对化学方法发展的历史考察，可以鲜明地看到：一部化学发展的历史，也是一部化学研究方法发展的历史。化学研究方法的水平是随着化学科学的发展而不断提高的；另一方面，化学研究方法的不断推陈出新，又极大地推动了化学科学的蓬勃发展。柳大纲先生说得好："化学穷物质转化运动之理，综宏析微，拨伪存真，精益求精，乃认识自然、改造自然之锁钥。"② 如果我们能借鉴历史、结合现实，十分注重科学思维方法的重要作用，自觉按化学辩证法规律实践，那么我们在运用化学这把认识、改造自然的"钥匙"时，可以更大地发挥主观能动性。

了解化学在改变人们的生活方式和思维方式中的重要作用

结合对化学发展的历史考察，通过对化学的对象、特点、地位与作用的系统分析，可以明显地看到：化学发展的各个历史时期所取得的成果，都不同程度地促进着科学的繁荣和社会的进步，对改变人们的生活方式和思维方式起着重要作用。

"摩擦生火"，从一定意义上可以说是一项最原始、最古老的化学技术发明，它"第一次使人支配了一种自然力"，是"人类对自然界的第一个伟大胜利。"③ 古代化学工艺的辉煌成就（尤其是青铜器、铁器的制造，造纸与火药的发明）不仅直接影响着社会的变革和文明的传播，而且为古代元素观与结构观的形成提供了重要的实践基础。

近代化学的成果更是显著：道尔顿测定原子的相对重量，开辟了对原子进行定量研究的途径，不仅使化学，而且给整个科学创造了一个中心；原子一分子学说的形成，使得人们对整个物质世界图景的认识推进到了三个层次的认识（物体一分子一原子）；有机物的无机合成填平了有机物和无机物之间的鸿沟，有机分子结构理论的建立和有机合成的蓬勃发展，为人们认识生命的起源及其本质开拓了广阔的前景。

现代化学的发展无论在广度还是在深度上都达到了从未有过的程度。现在，化学科学的物质成果已渗透到人类生活的各个领域，并正在为现代科学技术的革命不断提供新材料和开拓新能源；现代化学前沿领域的进展，为人们认识包括从元素到人在内的自然界的辩证发展的图景，为认识物理世界规律和生物发展规律的统一，为认识人和自然之间的辩证关系提供新的科学依据。

对化学人才的培养和智力开发提供咨询

通过对化学史上一批重要化学家的科学思想方法和研究方法，以及他们成才途径的分析和总结，可以对如何培养化学人才，化学家应具有什么样的知识结构、科学素养等，取得一些规律性的认识。这样有助于为化学科研机构的调整，为高等与中等化学教育体制和化学教学方法的改革，提供有益的咨询和借鉴。

---

① C.肖莱马：《有机化学的产生和发展》，科学出版社，1978年，96页。
② 柳大纲："中国化学会成立五十周年祝词"，《化学通报》1982年9期。
③ 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，92页。

丰富和发展辩证唯物主义的思想内容

化学哲学诸方面的研究内容，对于全面阐发辩证唯物主义的自然观、自然科学观和科学方法论都是十分需要的。通过对物质的化学运动形式和其它物质运动形式之间辩证关系的分析，尤其是对化学进化在自然界物质演化中的重要地位的探讨，有助于全面而科学地认识和把握整个自然界辩证发展的图景。其次，从化学发展的历史考察可以阐发自然科学发展的规律，这对充实和丰富人们关于自然科学观的认识是十分有益的。

此外，关于化学方法论的研究，其中不少内容（如化学合成、化学模型方法等）具有一般科学方法论的意义；而关于化学运动辩证内容的探讨与研究，可以丰富与发展辩证法规律和范畴的思想内容。

还应指出的是，包括化学在内的现代自然科学发展很快，积累了大量的材料，有待于运用辩证唯物主义观点进行概括。这方面有大量工作要做，回避它将使辩证唯物主义脱离当代自然科学成就而失去生命力。辩证唯物主义必须随着自然科学的发展而发展。我们不能满足于仅仅为辩证唯物主义提供若干个新的（例如化学上的）自然科学的例证。这就要求深入考察当代自然科学各个领域的进展。对于化学来说，则应该深入到现代化学发展的前沿领域，并努力运用马克思主义的基本观点与方法加以分析，从而引出必要的哲学结论来。这方面的研究工作是马克思主义哲学和自然辩证法基本理论研究的一个重要方面，也是化学哲学工作者的一项基本任务。这方面的研究工作如能搞得扎实、活跃而富有生气，那必将引起化学工作者、自然辩证法工作者和一切对自然科学哲学问题感兴趣的人们的共同关注。这种生动活泼局面的形成，无疑对哲学以及化学的发展都是颇有意义的。

盛　根　玉

（二）化学科学的对象和特点

1. 关于化学的定义问题

关于化学的定义，仅据初步查阅到的国内外文献看来，就有20多种不同的提法，至今未获统一。显然，这对于人们认识化学科学的性质、特点和功能，以及开展化学教学和研究工作，都是不太有利的。这就需要尽早确定出一个能够反映出化学科学主要特征的定义，以促进化学的发展。现将初步查阅到的20几种不同提法试分为五大类加以分析，并在此基础上提出一个尝试性的定义，供大家讨论。

笼　统　式　的　定　义

这一类的定义比较原则和一般化。比如美国著名化学家鲍林提到，“化学是研究物质的科学”①，日本的《万有百科大事典》中说，“化学是研究物质的性质的学问”②，美国的大百科全书（EA）中认为，化学是研究“物质的性质及其转变的科

① 鲍林：《化学》（上册），科学出版社，1982年，2页。

② 《日本万有百科大事典》，第15卷，1977年，106页。

学”①；苏联著名化学家涅克拉索夫说，化学是“关于物质及其变化的科学”②；日本的《世界大百科事典》也认为，“化学是研究物质的特性及其所确定现象的科学”③，等等。

在这些定义中，虽然提到了化学要研究“物质”和它的“性质”及“变化”，但是并没有具体指明究竟是要研究哪一种“物质”，什么样的“性质”和“变化”，从而未能反映出化学研究对象的特点，而是把它淹没在整个自然科学研究对象的共性之中了。因为，研究物质及其变化的规律，不仅是化学研究的对象，实际上，也正是整个自然科学的研究对象。

具体式的定义

这一类的定义比较细致，具体列出了许多所要研究的内容，看来是目前国内外比较流行的提法。例如苏联出版的《综合技术辞典》提到，化学是“关于物质及其组成、结构、属性和相互转化的科学”④；《美国科学技术百科全书》（AEST）提到，“化学是研究物质的性质、组成和结构，研究物质所发生的结构和组成的变化，以及随之产生的能量变化的科学”⑤；英国的《不列颠百科全书》（EB）也提到，化学是研究“物质的性质及其结构、组成和变化性”⑥的科学。此外，苏联的《教育科学辞典》也说，化学是研究“关于物质及其组成、结构、性质和变化的基本知识”⑦；我国最近出版的《辞海》中也具有这种看法，认为“化学是研究物质（单质及化合物）的组成、结构、性质及其变化规律的科学”⑧；我国的《化工辞典》⑨等也都提出了类似的定义。

这一类提法，虽然是比较详细地列出了所要研究的物质的“组成”、“结构”、“性质”、“变化”及其过程中的“能量”等方面，并因此而获得了广泛的承认和应用。但是，仔细看来，同前面提到的笼统式的定义一样，实际上也并没有能指明究竟是研究哪一种物质，是分子还是原子或是基本粒子的“组成”、“结构”和“性质”的“变化”？因而也就未能把化学研究的特殊对象同其它科学，特别是物理学的研究对象相区别，这不能不说是一个缺陷。

其中有的虽然能够提到是研究物质中的“单质和化合物”，但也似乎只是对研究内容的现象式的罗列，未能从本质上加以概括，也是一个不足。

微观式的定义

这一类的表述比较深入，能够从分子等微观粒子的角度加以定义。比如美国的著名高分子化学家弗洛里说，“我建议把化学定义为‘分子的科学’”⑩；恩格斯也指出

---

① *Encyclopedia Americana*, (6), 375 (1975).
② 涅克拉索夫：《普通化学教程》（上册），商务印书馆，1953年，1页。
③ 《日本世界大百科事典》，第5卷，日本平凡社，1978年，225页。
④ 《苏联综合技术辞典》，莫斯科，1976年，544页。
⑤ 《外国百科全书化学条目选译》，化学卷参考资料（下），中国大百科全书出版社，1979年，2页。
⑥ *Encyclopedia Britannica*, (5), 387 (1964).
⑦ 《ソビエト教育科学辞典》，日本明治图书社，223页。
⑧ 《辞海》（上），上海辞书出版社，1979年，477页。
⑨ 《化工辞典》，化学工业出版社，1970年，62页。
⑩ 《著名化学家论化学》，中国科学院化学研究所情报室，1980年，10页。

过，化学是“关于原子运动的科学”①；我国出版的《化学发展简史》一书中也说，化学是“研究物质在原子和分子水平的变化规律以及变化过程中的能量关系”的科学②；郑关林③等同志的提法也都大致如此，等等。

这些定义能够从物质的微观结构上加以阐述，注意揭示化学运动的本质，是很可取的。但是也似乎还有不甚明确和确切之处。比如“关于分子的科学”的提法也还是比较泛泛的。因为，实际上研究物质聚集状态及热现象的“分子物理学”，研究分子的性质和声波传播关系的“分子声学”等学科，也都可以说是“关于分子的科学”的一部分。这样，化学同它们之间的界限就难以区分了。

对于“原子运动的科学”的提法，如果从十九世纪来看还是可以的。因为当时原子可分性的事实尚未发现，人们对于“原子运动”的理解，只是看成为原子间的“分”与“合”。但是从今天来看就欠妥当了。现在，“关于原子的运动”的涵义，已经扩展到了原子的衰变、裂变、聚变等多种运动形式，而这些内容虽然在化学研究中也要涉及，但毕竟不是主要的，实际上大多是属于原子核物理学等物理学的研究领域，所以不应把它们做为代表性的对象而概括在化学定义之中。

关于在“原子—分子水平上的变化”的提法，主要的问题是未能区分出这两种实物粒子在化学研究中的主从地位。在化学中研究原子，并非是为了研究原子而研究原子，而主要是为了研究分子而研究原子。这应当是化学在研究原子问题上同物理学的主要区别所在。因此，对于化学来说，研究分子比研究原子更具有代表性。将二者并列提出就不能体现出这一特征。

扩 张 式 的 定 义

这一类的看法，是把化学定义得很宽，把相当一部分物理学的对象也做为代表性的特征而“扩张”到化学定义中来，形成了一种所谓“大化学”。比如有的同志认为，化学是研究“实物粒子（原子、原子核、基本粒子）的微观集合的质的规定性的变化”④的科学；还有的同志提到，“化学主要是研究物质各层次内的基本运动客体（分子、原子、原子核、基本粒子）产生变革的过程和规律”的科学，并明确指出，“化学科学的研究内容和对象应该有一个更为广泛的范畴”，不仅应当包括“分子的变革”，也应当包括“原子的变革”，以至“基本粒子的湮灭和生成过程”⑤等等。

应当看到，这种“大化学”定义的提出，能够考虑到现代化学同现代物理学之间的相互联系与渗透的趋向，也不无一定的道理。但是，从目前的化学研究实际来看，研究物质结构中“各层次”粒子的“质的规定性”的变化，还不能说已经成了主要的或具有代表性对象。化学的主要对象还只是分子的“质的规定性”的变化。因此，目前提出这种“大化学”定义，起码是还为时尚早。

此外，随着科学的发展，在化学中涉及“各层次”粒子的“质的规定性”变化的内

---

① 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，53页。
② 《化学发展简史》，科学出版社，1978年，1页。
③ 郑关林：《当代自然科学正在酝酿新的重大突破》，科学技术文献出版社，1979年，98页。
④ 中国自然辩证法研究会首届年会简报，1981年，第43期，2页。
⑤ 王正刚，“物质运动形式与化学科学”，中国自然辩证法研究会首届年会论文，1981年，2页。

容虽然会越来越多，但是，它们也将主要是为了研究分子的目的服务的。比如关于辐射化学，它虽然要涉及原子和基本粒子的质的变化，但也主要是研究这一变化中放出的辐射线所产生的化学效应，即分子的质变效应，仍然不会改变化学的传统的特征。因此，在今后相当长的一段时期内，即使这方面的内容增加再多，恐怕也不宜用研究“各层次”粒子的“质变”来定义化学。总之，化学研究中所要涉及到的内容和化学的定义，应当有所区别。

再者，这种“大化学”的定义，在实际的科学分类中，恐怕也很难能行得通。因为，尽管在化学定义中把原子和基本粒子的质变等都列为具有代表性的研究对象，可是物理学家都会不加理睬，他们仍然会照旧地把这些内容视为物理学的主要对象而加以研究。这个实际并不会因为“大化学”的定义而有什么改变。他们的科学实践并不可能承认“大化学”定义所赋予的科学分工。因而这种定义也就不会有什么实际上的意义。

哲学式的定义

这主要是一类从哲学的角度上对化学所做的概括。比如恩格斯曾经说过，“化学可以称为研究物体由于量的构成的变化而发生质变的科学”①，最近也有的同志提出，“化学是研究以原子间的化分和化合为基础的物质运动形式，以及这种运动形式与其它运动形式的关系的一门学科”②，还有的书中也说，化学是研究物质的“原子的化分与化合”的“特殊矛盾的科学”③等等。

这一类的定义，在哲学和自然辩证法的研究领域内是可以考虑的。但是在做为自然科学的化学中来说却很难直接引用。它会带来一些不便，比如这里提到的“化合”，同化学中的“化合”概念并不完全是一回事；而“化分”的概念又是化学中所没有的，等等。

另外，像“物体由于量的构成的变化而发生质变”的特征，现在已非化学科学所独有，而是涉及到了整个自然科学领域。因此，再提出以此做为化学的定义显然已不合适。

一个尝试性的定义

那么，究竟应当怎样为化学定义呢？

通过对以上五类定义的分析，并进一步做出概括，笔者认为，对于化学可否做出如下的定义：化学，主要是研究物质的分子转变规律的科学。

首先，这个定义可以指明，化学研究的主要对象是物质，不是意识形态；是物质中的实物粒子，不是场的形态；是实物粒子中的分子，不是原子、原子核和基本粒子等其它的实物粒子。对于具有代表性的主要研究对象的客体，能够表述具体而明确，从而可以避免只是笼统地提到“物质”以致同自然科学的一般对象相混淆的缺陷。

其次，也可以指明主要研究对象客体的运动形式的特征，是分子转变的运动，是由一种或几种分子转变为另外一种或几种新分子的运动，即分子的化学运动；不是分子的

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，49页。

② 《自然信息》，1981年4期，36页。

③ 《辞海》理科分册（上），上海辞书出版社，1978年，249页。

机械运动或热运动等其它的分子的非质变的运动。这样就可以克服只是泛泛地提到“分子”和“变化”，从而不易和物理学相区别的缺点。

第三，还可以包含除直接指明的主要研究对象以外的广泛内容。比如有的定义中常常提到要研究分子以及构成分子的原子和基本粒子的组成、结构、性质、变化，以及力、热、声、光、电等能量形式和场物质的作用等等，实际上都是掌握“分子转变的规律”所应当涉及或将要涉及的内容。这些内容虽未在定义中直接列出，但实际上已经是不言而喻地包含在“分子转变”的“规律”的涵义之中了。这样就可以使化学定义的表述，不致于是内容罗列、主次难分和文字过于冗长，而能够做到比较简明扼要，重点突出，便于掌握。

此外，在定义中由于加上了“主要”二字，就会使化学研究的内容具有更大的广泛性和灵活性，体现出化学同其它科学之间既有明确分工又有密切联系的相互关系。这就是说，从“主要”的对象看来，化学同其它科学是有明显区别的。但是，化学要研究它的“主要”对象，就必须涉及一系列的“次要”内容，如做为研究工具的数学、物理学等其它自然科学；提供科学思维和科学方法的哲学；促进化学转化为直接生产力的社会科学，等等。从这个角度看，化学同其它科学之间的界限又不是绝对明确的。这样，这个化学定义就体现了这种“明确”和“不明确”的对立统一，从而也就能比较符合化学的现实研究实际。

日本出版的一部大百科全书，在“化学”条目的解释中一开头就说，“化学，是很难用一两句话定义的”①。通过上述的讨论，笔者也深感确系如此。所以，这里提出的这种尝试性的化学定义，究竟是否合适，还需做进一步的讨论，以期能尽早确定一个比较公认的统一的结论。

廖正衡

2.化学研究的对象及其发展

化学研究的对象问题，是化学和化学哲学的一个基本问题。这个问题在化学和化学哲学文献中常常引起热烈的讨论。

许多学者正确地指出，化学的研究对象，正像其它科学的研究对象一样，不是一成不变的，而是随着实践和科学认识的发展而不断变化和发展的。有人曾经这样说过：“化学的目的似乎一个时期一个时期变化很大。一段时期化学可称为生命的理论，另一个时期成为冶金学的一个分支；有时研究燃烧，有时成为医学的帮手，某一段时期企图只给一个单词element（元素）下定义，另一段时期就探求所有现象的不变的基础。仿佛化学有时是手艺，有时是哲学，有时是秘术，有时是科学。”②

马克思主义哲学告诉我们，人的认识物质，就是认识物质的运动形式，而每一种运动形式都有其特殊的矛盾性，科学研究的区分，就是根据科学对象所具有的特殊矛盾性。本书前面刚刚提到了化学运动形式，它的特点和基本矛盾，以及化学运动形式与其它运

① 《日本万有百科大事典》，15卷，1977年，106页。
② 柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，69—70页。

动形式之间的区别和联系，后面也还要作进一步探讨。在这里，我们着重从物质客体方面讨论化学的研究对象及其发展。

从物质客体方面看近代化学的对象

十九世纪下半期，恩格斯在《自然辩证法》一书中，曾经明确地阐述了化学的研究对象，并着重从物质客体方面说明了化学与其它科学的区别和联系。他指出："自然科学的研究对象是运动着的物质，或者说物质的运动形式，化学运动是原子的运动，化学是'关于原子运动的科学'"①。恩格斯的这个论断是和他的物质运动学说密切联系的，也是符合当时化学发展的实际的，是恩格斯基于物质运动学说，概括和总结化学和整个自然科学的发展状况而提出来的。

我们首先从恩格斯的物质运动学说方面来分析。众所周知，关于物质运动形式及其相互关系的学说，在恩格斯的著作中，尤其是在《自然辩证法》中，占有极其重要的地位，这一学说构成《自然辩证法》一书的基本内容之一。恩格斯给物质的运动提出了一个科学的定义，他说："运动，就最一般的意义来说，就它被理解为存在方式，被理解为物质的固有属性来说，它包括宇宙中发生的一切变化和过程，从单纯的位置移动直到思维。"②这个定义包含着丰富的内容：第一，这个定义指出了物质和运动是不可分离的，运动是物质的存在方式、固有属性；第二，这个定义还指出了运动形式的多样性；第三，从前两个基本观点中自然引伸出第三个观点，即具体的物质形式和具体的运动形式同样是不可分离的，换个说法，每种具体的物质形式都有其具体的运动形式，每种具体的运动形式也都有它的物质基础，或者说物质负荷者。关于这第三个观点，按照苏联著名的哲学家凯德洛夫的意见，是恩格斯于十九世纪七十年代紧接着运动形式之后所提出的一个重要论点，是一个重要的发现③。恩格斯将这些观点与关于自然科学的分类问题相联系，并考察了自然科学的实际状况，得出了这样的结论：机械运动是位置变动，即天体和地球上的物体的位置移动，物理运动是分子的运动，化学运动是原子的运动，生命是蛋白体的存在方式。在这里，恩格斯着重从物质负荷者方面划分了各种运动形式，从而也就划分了各门科学，规定了各门科学的研究对象。

恩格斯关于化学科学研究对象的论断，符合当时化学发展的实际状况。化学，从它的萌芽、产生时起，就是研究物质的性质及其转化的。人类对物质的性质及其转化的真正科学的认识，是从波义耳提出科学的化学元素概念开始的。后来，随着对元素的研究和新元素的发现，积累起日益增多的化学事实，特别是关于气体元素的研究，氧的发现，拉瓦锡才得以推翻燃素说，建立起化学史上第一个科学的理论，即氧化燃烧理论，使化学转化成科学。但是，正如恩格斯所指出的，"化学中的新时代是随着原子论开始的"④。自从道尔顿确立了化学原子论，在化学中对原子进行了广泛而又深入的研究，继而又产生了分子概念。十九世纪，化学是以原子分子学说为中心逐步发展起来的，其中关于原子的性质及其在物质化学变化中的作用的研究，成为化学的主要内容。从成果

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，53页。
② 同①。
③ 参见勃·凯德洛夫：《论恩格斯〈自然辩证法〉》，三联书店，1980年，第75—77页。
④ 同①，269页。

来看，到十九世纪中叶，发现了许多新的原子（自建立原子论后，作为当时科学分析的最后界限的化学元素，找到了自己的物质内容，这就是原子）；认识了原子的许多性质，如原子量、化学键、原子价等；发现了化学元素之间的联系和规律——化学元素周期律；对于原子是怎样形成分子的问题有了初步的认识，建立了经典化学结构理论。总起来说，化学家们初步搞清楚了，物质的化学变化是通过原子之间的化合、分子的分解或分子内原子的重新组合，从而使一种分子转变成另一种分子的过程。

综上所述，从古代至十九世纪，化学沿着物质转化这个线索延续下来，继之发现了物质转化的内在根据，这就是原子，并在研究原子的道路上获得了迅速发展，取得了巨大成就。这些分析说明，在十九世纪，原子和原子引起的物质的化学变化，成了化学研究的主要内容，化学研究的中心。面对这个现实，恩格斯从哲学方面，从物质运动形式这个观点考察问题，提出了化学是研究原子运动的科学。恩格斯同时代的一些化学家，则从化学的观点，从化学的研究内容出发，也提出了类似的见解。例如，门捷列夫于1871年写道："…直到现在化学家们的眼界被限制在作为科学分析的最后界限的化学元素概念，因此可以把现代状态的化学称为关于元素的学说。"①不同的是，恩格斯站在辩证唯物主义哲学的高度，预言了原子不是不可再分的物质粒子，而一些化学家则受科学发展历史的局限和形而上学思维方法的影响，把原子视为不能再分的物质粒子，即使像门捷列夫这样杰出的化学家，也未能摆脱这种影响。

为了进一步说明化学的研究对象，让我们再回到物质运动学说上来，同时与物理学作一个比较。我们说物质和运动是不可分割的，没有不运动的物质，也没有无物质的运动，这是客观的事实。然而，在科学研究中有时从物质实体入手，有时从运动形式入手。按照认识规律，在科学的发展中，研究了物质实体以后要进一步了解该物质实体的运动和它的运动规律；同样，研究了运动形式以后，需要进一步了解它的物质基础。从这方面看问题，十八、十九世纪，化学和物理学是沿着不同的路径发展的。

从十八世纪到十九世纪中叶，化学着重研究了物质的组成和结构，建立了原子分子学说，这是十九世纪自然科学在物质结构方面所取得的最大成果，它在人类认识史上第一次确立了关于无生命世界的原子—分子—物体三层次的物质结构图景。应当强调指出，十九世纪的原子分子学说主要是在化学的土壤中生长起来的，它主要是依据化学事实建立的，又是在化学研究中发展的，带有明显的化学特征，可以称为化学原子论。从十九世纪中叶开始，在原子分子论等关于物质的组成和结构的认识基础上，化学进一步研究了化学反应过程，促使对反应的方向、限度以及速度等等方面的认识深化了。

在同一时期，物理学又是怎样发展的呢？近代物理学主要是对热、光、声、电、磁等进行了研究，先是把这些现象作为既成的事物进行描述和测量，继之总结出一些物理定律，从而能够对物理学所研究的现象作出理论上的解释和预见。可以看出，物理学比较地偏重于运动形式本身，用物理学的术语说，着重研究了能量的形式。在关于这些能量形式的物质基础方面，到十九世纪，物理学已经确定，热运动的物质负荷者是分子，热是分子的运动；电磁学研究中确立了场的概念，并将电、磁和光统一了起来；至于电（或者说电流）是什么物质的运动，当时还未搞清楚；在磁学中，当时也只能求助于分

---

① 转引自《苏联大百科全书》，1957年，第46卷，163页。

子和电流①。这些情况说明，就物质客体方面来说，物理学的主要成就是弄清了热是分子的运动，在其它领域正面临进一步探索运动的物质基础的任务。正像恩格斯谈到电学的发展时所指出的："什么是电运动的真正物质基础，什么东西的运动引起电现象"②。"在电学的领域中，一个像道尔顿的发现那样能给整个科学创造一个中心并给研究工作打下巩固基础的发现，现在还有待人们去探求"③。

这样，总览发展到十九世纪的化学和物理学的实际状况，恩格斯从物质客体方面规定了化学和物理学的研究对象，并将它们作了适当的划分。化学研究了原子和分子，但是，原子是化学变化的起始粒子，是化学变化的内在的物质基础。物理学所研究的领域中，当时弄清楚了的物质负荷者是分子，分子在物理变化中表现为起始的物质粒子；同时已有迹象表明，物理变化还涉及到其它方面。恩格斯已经看到了这个事实，因此，当他把物理学确定为关于分子运动的理论的同时，作了必要的补充性说明。恩格斯说："当我们把物理学叫做分子运动的力学的时候，不要忽略这个术语决不包括现代物理学的整个领域。恰恰相反。作为光和辐射热这些现象的媒介的以太振动，肯定不是现时意义下的分子运动。但是以太振动在地球上的作用首先要关联到分子，因为光的折射，光的偏振作用等等，都是由有关物体的分子构造所决定的。"④

从物质客体方面看现代化学的对象

恩格斯关于原子具有复杂结构的观点，关于电的物质基础的科学预言，都被现代自然科学的新发现证实了。十九世纪末二十世纪以来发现了电子、天然放射性等新的现象以后，发生了物理学革命，自然科学开始从宏观领域深入到微观领域，物理学不仅揭示了电的物质基础，揭示了原子的组成和结构，而且揭示了物质的更深层次的奥秘，深入到原子核、基本粒子乃至夸克的内部。现代物理学促进了化学的发展，化学所研究的物质客体也进一步扩大了。在探讨现代化学的研究对象的时候，需要简略地概述一下化学（有时与物理学一起，或借助于物理学的帮助）所发现的新的物质不连续形式（或叫物质粒子）及其历史。

首先谈谈离子。在道尔顿建立化学原子论的前后，由于伏特发明了电堆，出现了恒稳电源，引起了对电源和电解的研究，而这两者都涉及电解质在溶液中以何种状态存在，和电对电解质发生何种作用这样的问题。1832—1834年，法拉第归纳电解实验的结果提出了电解定律，在分析电解机理时他想到，盐溶液在电流作用下一定产生了自身带电从而使溶液导电的物质，法拉第把溶液中被电流分解后能输运电流的荷电物质定义为离子，把带正电荷向阴极移动的离子叫阳离子，而把带负电荷向阳极移动的离子叫阴离子。法拉第认为只有在电流作用下溶液中物质的分子才被分解为离子，不通电时物质仍以分子存在。1887年，阿累尼乌斯进一步提出，盐溶于水中不通电即能自动地离解成正、负离子，第一次确定了离子在溶液中的游离存在。二十世纪晶体结构分析证实固态的盐和金属氢氧化物都是由离子构成的。在大气中也发现了离子。发现电子、建立原子模型

① 参见弗·卡约里：《物理学史》，内蒙古人民出版社，1981年，250—251页。
② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，101页。
③ 同②，96页。
④ 同②90，91页。

以后人们明确认识到，离子是原子（或原子团）失去或获得电子而形成的带电粒子。

其次讲到络合粒子或配位粒子。十九世纪中叶建立了原子价理论和分子结构学说以后，化学家们就注意到一些化合物比较简单，称作简单化合物，也叫原子化合物，它们可以用已有的原子价理论进行解释；另一些化合物比较复杂，曾被称作分子化合物，它们不能用原子价理论做出满意的说明。十九世纪末，维尔纳把那些在水溶液中具有稳定性，以及不分解或分解度很小的化合物称为络合物，并且提出了配位理论。他指出，一些金属原子除了通过通常的原子价（他称之为主价）与其它基团结合以外，还有副价使之进一步与其它基团结合。二十世纪二十年代产生了配位键理论，五十年代发展了配位场理论。迄今为止，尽管对络合物（现叫配位化合物）有着不同看法，对它的定义有不同的表述，然而以配位键形成的配位粒子的存在已是不容否认的事实。

早在化学原子论建立以前，化学中已产生了基的概念。据肖莱马考证①，最先应用基（la base）或根（Le radical）这些术语的是拉瓦锡的友人德莫武，而拉瓦锡本人则把化合物中和氧结合的部分叫做基或根。后来经过贝采里乌斯、维勒和李比希发展成有机化学中的基团理论。依照这个理论，基是有机化合物中不发生变化的原子团，它的作用犹如无机化合物中的元素。这个理论使人自然地提出了制备游离的基（即自由基）的可能性问题。十九世纪四十至六十年代，弗兰克兰、柯尔柏和布特列洛夫等分别用不同方法试图得到自由基，但都没有成功。直到1900年，格别哥第一次证明了三苯甲基自由基的存在，1929年潘内斯等又测定了甲基和乙基的生成，人们还得到了稳定自由基。实际研究表明，除了含碳有机自由基以外，还存在含氧和含氮的有机自由基。

进入二十世纪，对胶体的研究发展到了一个新阶段。虽然人类很早就接触了胶体，而且对胶体进行了广泛研究，如1809年列依斯发现胶体的电泳现象，1827年布朗观察到藤黄粒子在水中的无规则运动，1861年格雷阿姆提出了“胶体”这个术语，1868年丁铎尔研究了胶体粒子对光的散射效应，等等；但是，只是到了二十世纪才确定了胶体是分散相粒子和分散介质形成的多相体系，发展了直接观察胶粒的手段，揭示了胶粒的结构。

二十世纪确定的另一种物质粒子是高分子。人类很早就和高分子物质打交道，到十九世纪中叶发展到对高分子物质进行改性加工，但是人们并不真正认识高分子。二十世纪二十至三十年代，建立起大分子的链状结构概念，认识了高分子粒子的组成和结构。高分子是大量原子以共价键结合起来的大分子，高聚物和生物大分子都是高分子。

最后应当谈谈电子和原子核。十九世纪末发现天然放射性和电子以后，二十世纪对原子内部结构的研究得到了迅速发展。1902年卢瑟福和索迪提出了放射性现象是基于元素的转变的假设，1911年索迪提出了同位素概念，1912年卢瑟福建立了原子的有核模型，1913年玻尔从理论上论证了原子核外的电子壳层结构，同年这种原子模型在第一届国际索尔维代表大会上得到了公认。一系列的研究工作，一方面揭示出原子和离子的性质，分子以及其它物质粒子的结构和性质，都与原子核外的电子壳层结构密切联系着，原子核外的电子（最外层电子）是化学键的物质承担者；另一方面，在原子核这个层次上展示了化学的一个新领域，即核化学领域。与原子层次上的化学元素相对应，在原子核层次上提出了核素概念。

---

① 肖莱马：《有机化学的产生和发展》，科学出版社，1978年，11—21页。

此外，现代化学还发现了一些不稳定的粒子。例如，在化学动力学研究中，早在十九世纪就提出了活化分子的概念，二十世纪发展起来的过渡态理论又提出了活化络合物的概念，这些都反映了化学研究对象的不同的物质客体。

上面所举出的都是物质的不连续形式，是化学实际上研究着的物质客体。现在的问题，是如何对这些物质客体进行分类，在理论上怎样进行概括？从国内外的化学文献和化学哲学文献来看，对此有着不同的理解，存在着不同的观点。在这里，我们介绍两种观点，这两种观点就其基本倾向来说是互相对立的。

一种观点认为，原子和分子概念可以概括现代化学所研究的全部物质客体。在这种观点看来，原子概念也好，分子概念也好，都是发展的。原子、原子离子等，都属于原子范畴，而由一个以上原子结合而成的稳定的最小实体或体系，都称为分子，或称为广义分子，这种分子是参与化学反应的基本单元。按照这种观点，自由基是分子，高分子是分子，金刚石和氯化钠的晶体中也存在分子，或者把它们称为一类“宏观的分子”或“巨大分子”的物质[①]。这样，化学的研究对象则可以用这种扩大了的或说发展了的分子概念进行概括。

另一种观点认为，由于自十九世纪以来，化学研究中发现了许多新的物质的不连续形式，使现代化学原子论不同于古典的原子分子论，已超出了它的范围，被提到了在质上是新的更高的阶段了。为了能够在理论上反映化学发展的新情况，概括化学中的新事实，应当提出新的概念，有的文献提出了化学粒子和化学粒子质的多样性的概念[②]。依照这种观点，原子、分子各自只是物质的一种不连续形式，化学粒子质的多样性的发现表明，化学原子论体系是不断发展的，它们最初建立在只存在一种粒子形式——原子的观念上，后来发现了分子，建立在两种粒子形式——原子和分子的观念上，现在发现了多种粒子，又建立在化学粒子质的多样性的观念上。可以把化学所研究的物质的不连续形式，分别地看作结构单元，它们本身又是由其它结构单元构成的。例如原子核和核外电子是构成原子和原子离子的结构单元，而原子又是构成分子、分子离子、自由基、原子团等等的结构单元，构成高分子的结构单元是链节，构成晶体的结构单元是晶胞，而晶胞可以由原子、离子或分子组成，如此等等。这些粒子形成化学研究的物质客体，大致可以分成三个层次：（1）原子层次，包括原子、原子离子、介子原子等；（2）分子层次，包括分子、分子离子、自由基、活化分子、原子团等；（3）超分子层次，如高分子、分子的球形复合物，原纤状复合物、晶体等。这样看来，化学所研究的物质客体，形成一个从简单到复杂的序列，原子一端与物质结构的下一个层次——原子核衔接；另一端又可分成两个分支，一支以复杂的聚合物形式与具有生命活性的物质联系，另一支以结晶形物质（或超分子层次的物质形式）向地质化学的研究对象过渡，并与凝聚态物理学相联系。

上述的两种观点尽管是互相对立的，但有一点却是相同的，这就是都承认现代化学

---

① 参见无机化学编写组：《无机化学》上册，人民教育出版社，1978年，39页；吴征铠：“分子——一个发展着的化学概念”，《化学教育》，1982年，第6期；吴祺，“分子概念的变迁”，《化学教育》，1983年，第1期等。

② 参见苏联学者P.B.卡尔考文柯：《现代化学的哲学问题》，莫斯科，1970年，8—20页；该作者的论文：“化学粒子质的多样性和现代化学的某些方法论问题”，苏《哲学问题》，1963年，第5期；B.H.博里·亚兹，E.Ф.萨拉波夫：《化学的哲学问题》，列宁格勒，1976年，229页。

发现和研究了许多新的物质的不连续形式，而且对这些物质形式（或者说物质客体）需要给予理论上的说明，只不过在具体的说明方式上不同罢了。这就表明，现代化学的研究对象，从物质客体方面来说，是扩大了，发展了，许多文章的作者看到了这个事实，并试图从理论上作出解释。当然，也还有这样的文章，它的作者在讨论化学研究的对象问题时，无视或不理会这种扩大和发展，而仍然沿用老的观念。

应当看到，化学与物理学研究的对象既有区别又有联系，本书中有专文讨论，此处从略。

通过上面的分析可以看出，现代化学发现和研究了多种多样的物质粒子，从物质结构层次上说，它涉及原子核、原子、分子（或者再加上超分子）这样几个层次。同物理学比较，在原子核层次，化学和物理学共同点多些；而在原子和分子层次上，化学和物理学各有自己的特点，比如在原子层次上，化学要研究一百多种化学元素，形成了具有丰富内容的元素化学，而元素化学要研究各种元素，还可以进一步划分出稀有金属化学、过渡元素化学、放射性元素化学、镧系元素化学等，而物理学研究原子则主要研究原子的一般结构及其运动规律；在分子层次上，化学的特点更为突出，而且随着新分子的合成，化学的研究对象范围还在不断扩大。有些文章指出，现代化学研究的重点是分子，正是在这个意义上，有人提出，化学主要是研究物质分子的科学，或者说主要是研究物质分子转变的科学。这当然不是说，化学不研究原子和原子核，这正如在十九世纪，恩格斯把化学规定为原子运动的科学时，丝毫也不表示化学不研究分子。实际上，十九世纪的化学也研究分子，只不过重点在原子，这在前面已经讲过了。

总起来说，科学发展了，化学研究的物质客体扩大了、发展了，化学研究的重点也有所变化。认识这些发展和变化，无论是对于化学研究还是对于化学哲学研究，都是必要的，有益的。

张 嘉 同

3. 化学科学的特点

从对化学研究对象的考察可以看出，人们对化学研究对象的认识经历了漫长而曲折的历史过程，才逐步达到比较全面深刻的理解。作为自然科学基础学科之一的化学，就其科学意义来说，是在原子和分子水平、而主要是在分子水平上研究物质的组成、结构和性能及其相互转化的规律性的科学。由于化学科学特有的研究对象，既以微观本质为基础，又具有多层次性，致使化学科学具有许多与其它学科不尽相同的特点。了解这些特点，将使我们能够更好地从总体上认识化学科学。

化学科学是实验性较强的学科之一

任何一门自然科学都是以其科学实验（包括观察、测量在内）作为直接基础的。全部自然科学史充分证明，科学实验是自然科学赖以建立、检验和发展的基础和动力。就此说来，化学不仅不能例外，而且它还是实验性较强的学科之一。这意味着，无论从其产生还是发展来说，化学总是非常强烈地依赖使用独具特色的实验技术手段而进行的化学实验。

化学实验之所以能与其它学科的科学实验相区别，其内在根据完全在于化学研究对象的自身特性。

人类认识自然界物质，从大的方面来考察，无非是从两个方面来把握。一是以物质自身相对不变而只考察其在时空中的运动、状态的变化，一是考察物质自身特性的变化。化学主要研究的是后者。加之，与人类生存发展关系至为密切的自然物质，皆是形形色色无数的宏观表现的分子聚集态。这种情况，无疑会带来研究的复杂性，既要研究这些物质自身的变化，又得先弄清其组成、结构和性能，这更增加了研究的复杂程度。这些情况，使化学只有依赖必不可少的变革物质的实验。

也正因为化学要从物质自身特性的变化中了解物质的组成、结构和性能，又从物质的组成、结构和性能的分析中进一步把握物质自身特性的变化，致使化学实验技术独具特色。它要对物质进行"解剖"，这种"解剖"要用到各式各样的系列的分析仪器和试剂、溶剂等，并且要采用从定性分析开始的、以至定性和定量相结合的一系列的分析方法，用以分析和检验化学物质，探求其变化之精微。更要以分析所取得的认识成果为指导，去进行化学物质的合成，以期扩充人们对化学物质的认识，检验化学理论的正误，推动化学科学的发展。

化学科学使用特定的概念、定律和理论

使用特定的概念、定律和理论，是化学科学的一个显著特点。

由于化学研究对象的特殊性，人们对于其认识成果以及思维过程，必然以特定的科学概念、定律和理论加以总结概括和反映。这样，化学科学就能与其它自然科学区别开来。更由于化学研究对象的复杂性和层次性，致使化学科学成为以多种多样的特定概念、定律和理论所构成的相互结合的复杂的多层次的知识系统。而化学科学的发展，则不断地体现在这些特定概念、定律和理论的逐步更替、增加、精确和完善的运动当中。

众所周知，元素概念是化学科学的最基本概念。正是由于提出了元素概念（1661年），才开始把化学确立为科学。并为化学元素的相继发现及其知识系统化，直至化学物质组成理论的建立奠定了基础。其间，并且要经过质量守恒定律（1789年）、当量定律（1791年）、定比定律（1799年）和倍比定律（1803年）等化学基本定律的发现，才导致近代化学原子论的建立（1803年）。更由于分子假说的被确认，使人们认识到原子和分子的区别和联系，从而建立了原子分子论这样统一的物质组成的理论。到1869年，由于发现了"元素性质随原子量的递增而发生周期性变化"的规律性，从而总结出元素周期律理论，将元素知识纳入了严整的自然体系之中，这是元素和物质组成认识的一次辩证综合。以后，随着同位素的发现和原子核电荷数的测定，不仅元素周期律的微观机理业已阐明，而且元素概念也已更加精确而现代化，如1923年国际原子量委员会通过决议正式规定了元素的现代定义：化学元素是指核电荷数相同（即质子数相同）的一类原子的总称。

在有机化学中，有机化合物这个基本概念确立之后，由于同分异构现象的发现而形成了相应的概念，使人们开始认识到化学物质的组成要通过不同的结构而决定其性质。接着又形成了同系列的概念，从而能够建立起有机化合物分类系统。加之，原子价概念的确立，各有机化合物分子结构理论的建立提供了先决条件。特别是凯库勒和库帕分别

提出了碳是四价和碳碳可以连成链状的学说，为有机化合物分子结构理论的建立奠定了基础。这个理论于1861年由俄国化学家布特列洛夫建立起来了。1874年，荷兰化学家范霍夫和法国化学家勒贝尔总结有机化合物旋光异构的研究，分别提出了碳的四面体构型学说，形成了有机立体化学。它推动了经典有机结构理论向前发展，并且其本身也成为这种理论的一个重要组成部分。到了本世纪上半叶，有机立体化学中又提出了构像概念，使它发展到一个新水平。挪威化学家哈塞尔研究了环己烷的椅式和船式两种构像式，并且指出这些立体结构可以通过单键的旋转而相互转换。这种由单键旋转而产生的立体异构体，就是现在所说的构像异构体。

仅从以上无机化学和有机化学中摘取的片段论述，就足以窥见化学科学使用着特定的概念、定律和理论。化学的其它分支学科，也同样如此，概莫能外。而整个化学科学，正是由这样多种多样的概念、定律和理论构成的相互联系的复杂的多层次的庞大知识系统。

化学科学有自己的一套科学语言

任何一门自然科学，皆以不同于自然语言（虽然它要以自然语言为基础）的科学语言来表征其特有的概念、定律和理论。化学科学有自己的一套科学语言，显现出自已的特点。

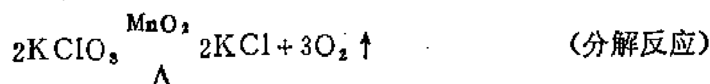
在化学科学语言中，最具有特色的是形式化的符号语言和形象化的图形语言，化学模型也属于图形语言。

化学元素符号是化学符号语言的最基本单元。它以简明、一义、约定的形式标志着具体的化学研究对象，是科学抽象的元素概念的形式表达。

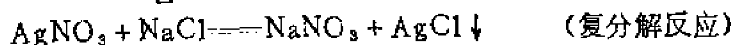
现在通用的化学元素符号，是1813年贝采里乌斯首先提出来的。他采用每种元素名称的拉丁文的开头字母作为化学符号的代表，如果第一个字母与其它元素的名称相同，则要再加上第二个字母用小写来表示。并且规定每一个化学元素符号，在化学表达式中各代表一个原子，再冠以数字，用以表达化学式中每种原子的数目。这样，不仅规定了元素符号，也同时确定了分子式的概念。如O_2、H_2O、$NaOH$、H_2SO_4、KCl、CH_4、$CHCl_3$、CH_3CHO、CH_3COOH……等等。

有了化学元素符号这个最基本单元，在此基础上，再加添一些表示某种属性的符号，就能表达和凝结我们对化学元素方面的越发深入的认识。如表明原子结构要用到核电荷数、电子数、中子数和质子数符号等等。

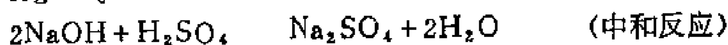
利用化学元素符号，我们还将方便而简洁地通过化学方程式具体体现了化学基本定律，如定组成定律、物质不灭定律等，用以表示化学反应原理及具体反应结果。如：



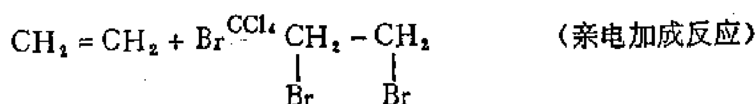
$$2KClO_3 \xrightarrow[\Delta]{MnO_2} 2KCl + 3O_2\uparrow \qquad \text{（分解反应）}$$



$$AgNO_3 + NaCl = NaNO_3 + AgCl\downarrow \qquad \text{（复分解反应）}$$



$$2NaOH + H_2SO_4 \quad Na_2SO_4 + 2H_2O \qquad \text{（中和反应）}$$



$$CH_2 = CH_2 + Br \xrightarrow{CCl_4} \underset{Br}{CH_2} - \underset{Br}{CH_2} \qquad \text{（亲电加成反应）}$$

不仅如此，在有机合成中，人们还可用更加抽象的符号以方程的形式来表示反应类型。如：


AB + C ⟶ AC + B　　（置换反应）

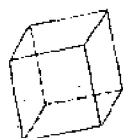

AB + C ⟶ ABC　　（加成反应）

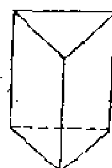

ABC ⟶ AB + C　　（消除反应）

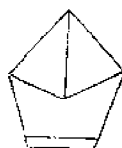
有了化学方程式，也就便于化学计算了。

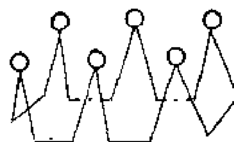
化学符号语言与图形语言（包括模型在内）相结合，使化学概念等的表达更具形象的特色。这种语言最初发源于对苯的分子结构的理解：如用⬡或⌬来表示，它把无机化学中的化学式和"龟壳"状图形结合起来，这种新颖的"形象概念"是以形象思维加深抽象思维的结果。因此，它既易于为思维所把握，又更近似于正确和深刻地反映了有机分子的化学结构。在此基础上，就能更加形象地表达有机分子化合物的结构与特性的关系，以及复杂的反应历程等，如：

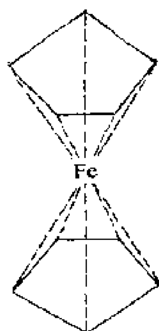
有机化合物中的笼型化合物


立方烷

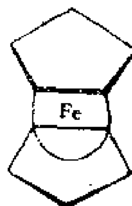

棱烷


盆式烯


冠醚类化合物 18-冠-6

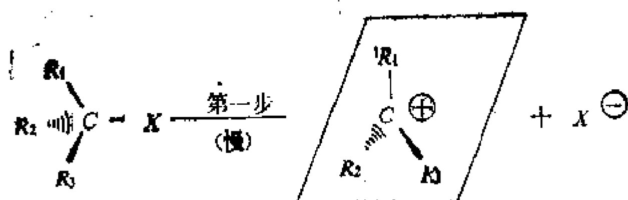


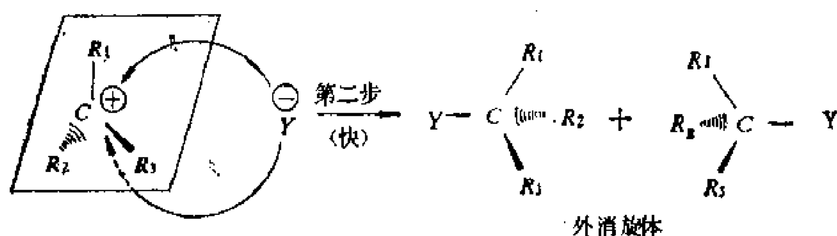
或



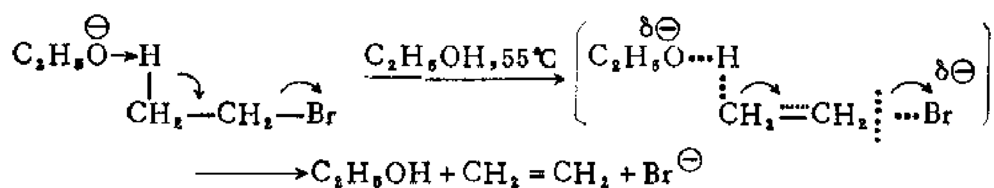
夹心结构化合物二茂铁的结构式

在反应历程中，如单分子亲核取代反应（SN1）

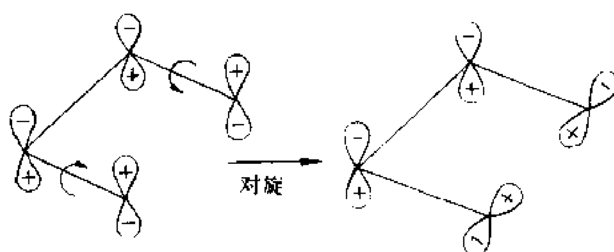




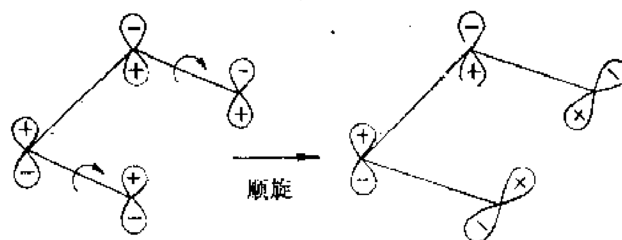
双分子消除反应（E 2）



丁二烯电环化反应



（基态顺旋有利于反应进行）



（激发态对旋有利于反应进行）

上述笼型、王冠型（冠醚类）、夹心型等多么形象，可是却能具体地反映出有机化合物的结构和特性的关系，帮助我们更深刻地认识分子中不同原子的内在联系。因而，对于复杂的反应历程，也能给以形象的简明的深刻的表示。

化学科学具有较强的经验性

化学科学具有较强的经验性是它的又一显著特点。其所以具有这个特点，最根本的原因在于化学研究对象本身。正如前面所述及的，化学研究对象既以微观本质为基础，又具有多层次性，并且具体的化学物质又包含着丰富多样的内容。这样，化学研究对象就具有复杂性，正是这种复杂性带来了化学科学的又一特点：它的经验性较强。

众所周知，只有通过化学实验才能获得有关的经验事实，取得有关的经验知识，对大量的丰富的经验知识加以总结，并使之系统化，才构成具有相应理论水平的经验科学。这就是说，化学科学的大量的概念、定律、假说或学说，多是运用归纳方法对经验事实进行一层深入一层地概括总结得到的，其中多是经验的或半经验的关系式，它们反映出在一定条件下各种相关因素之间的合乎规律的内在联系，为化学研究提供了各种较为正确的理论解释。直到总结出化学元素周期律为基础的理论体系，使人们对化学物质的认识达到了它的第一级本质，达到了说明化学物质的宏观现象的静态的定性的描述和经验、半经验的唯象理论的水平。化学科学花了二百多年时间走着这条经验科学的发展道路。可见，化学研究对象的复杂性，使得化学科学的经验性较强。

不仅如此，既使化学科学由经验科学向理论科学过渡的今天，它还是具有较强的经验性，而这种情况，仍然是化学研究对象的复杂性决定的。

对于复杂的天然化合物，通过现代测试手段已能测定其结构，掌握其特性。可是要合成这种化合物，在现在还达不到只凭理论计算的推导而设计方案进而合成出来。实际情况是它既要有现有的某些理论来指导，又要结合经验因素，包括设计的经验和娴熟的实验技巧。这是因为在目前，绝大多数化学反应虽然可以从理论方面来定性地预测其结果，可是有时多种结果并存的可能性也是存在的，这就使得化学家的经验和判断起重要作用。从需要55步的叶绿素合成，或更为艰巨复杂的维生素B_{12}的全合成，就足以从理论因素和经验因素的辩证统一中说明经验因素的作用。

若从非天然化合物的合成和发现来考察，最初的合成也并不是由确定的理论指导而自觉地合成的。且先不说它的合成往往带有一定的偶然成分，它的合成和发现，首先是提供了崭新的经验事实，然后才是对它的结构的测定和理论的解释。如二茂铁结构的发现就是明证。可见，人们对非天然化合物的认识，仍然要靠经验事实来提供，而这种提供还是不断增多的趋势。这样，化学科学至今仍有一部分工作需要处理经验材料，进行归纳总结等等。

再从反映化学键微观本质的现代价键理论的发展来说，起初是发展半经验性的分子轨道理论，以显其在揭示有机化学中共轭分子化学键本质的有效性，并总结出各种化学键模型，用以阐明金属、半导体、晶体等材料的结构和性能的关系，以后才由定性向定量水平发展，并且发展了"从头计算"方法。即使如此，如果不结合经验事实，也将窒息其发展。这种情况也从一个侧面说明化学科学的经验性较强。

化学科学具有较强的经验性，与化学的实效性也有一定的关系。因为化学科学的基础研究和应用研究，从总的方面看结合得较为密切。首先是考虑应用为主，然后才是理论的说明。这样，长此以往，已在化学家中间形成了一种思想传统，从实效出发，非常重视经验，如果理论上还不能完满解释也无妨。这倒是一个值得探讨的问题。

总之，化学科学的经验性较强，说明了化学科学的发展仍在不断地提供着经验材料，实验的经验和技巧等经验因素仍在起着重要作用，化学问题仍然不能达到象物理学那样，由理论计算来预测和解决的程度。所以，现在看到的化学上积累了大量经验事实，而现有的理论又不能完满地给以解释的矛盾现象，自然也就不足为奇了。

化学科学与工业联系比较直接

化学从其工艺知识开始，就具有与社会生产和生活的紧密联系，化学具有非常实用的价值。化学研究总是直接感受到社会需求的强烈刺激，并以其应用为研究目的的。尤其是在十八世纪后期至十九世纪初的产业革命的风暴中，大大促进了化学工业的发展，并为化学科学提供了更加丰富的具体的研究对象，提供了新的实验技术条件，开拓了广阔的研究领域。采矿、冶金的需要推动了无机、有机化学的发展；纺织、印染又促进了氯气漂白、有机染料方面的化学研究，推动了基础化工、酸碱工业的发展；炼焦工业废气和煤焦油的综合利用，又为有机化学大发展铺平了道路。

近代基础化工生产是从酸碱工业开始的。十八世纪以前的化工生产，实质上是以传统的经验和工艺为基础而缺乏化学科学为依据的。到了十八世纪，由于化学家进行了大量的酸碱反应的化学实验，不断积累并丰富了化学知识，于是以化学科学为基础的酸碱工业兴起。1788年，路布兰发明了以氯化钠为原料的制碱方法，经四年努力又创出一套完整的工艺流程。并且在化工原理和化工设备方面又得到不断地改进，使原料能实现综合利用。这才出现了以化学科学为基础的新化学工业。它是现代化大型联合化学工业发展的原始雏型，开创了化学科学与工业联系比较直接的先声。

有机合成化学工业的出现，也有类似的情况。十九世纪二十年代，德国化学家维勒合成了尿素，开辟了由无机物合成天然有机物的道路。化学家以煤焦油的芳香族化合物为原料进行了大量有机合成研究，其中合成的硝基苯和苯胺，为有机染料的合成奠定了基础。1856年帕金以工业苯胺为原料合成了有机染料苯胺紫，并且设计成功工艺路线。这就从合成染料方面开创了近代有机合成化学工业。接着制药工业、炸药工业兴起。二十世纪以来，又合成了多种非天然的有机和无机化合物，合成橡胶、纤维、塑料等高分子化合物以及金属陶瓷等，均已进行工业生产。

通过上述情况分析不难看出，化学科学与工业的联系比较直接的表现，首先是化学科学在人类历史中，首创了由实验室走向生产的途径：由基础研究和应用研究相结合的化学实验，进而制定出原料路线和工艺流程，到开发研究最后投入工业生产，创立了新兴的化学工业。

二十世纪以来，化学科学与工业联系比较直接又出现了新的表现形式。正是由于化学科学的广泛渗透性，化学科学已成为材料工业、原子能工业、电子工业、宇航工业以及生物工程等中间不可缺少的基础研究和应用研究，而化工产品几乎遍及一切生产部门和生活领域。现在，化学科学正向着人们需要的具有反应定向性和选择性的"分子设计"不断迈进，向着新的化学能源的研究和开发，海洋的研究和开发以及生命科学的研究进军。

正由于化学科学与工业联系比较直接，因而在现代化国家中，化工生产已成为基础的重工业部门，化学化工研究人员也远较其它工业部门和其它学科为多。化学化工已成为现代化国家的军事及国民经济发展的主要力量之一。

从化学的特点的分析中，我们可以看到化学有着实验和实用两股力量汇合而成的光荣的鲜明的科学传统。它是生命之流，现在以至将来，总会蓬勃发展永不枯竭，这是人类伟大创造力的一种表现。化学科学发展到现代化学阶段，又出现了从宏观向微观过渡，从定性向定量过渡，从静态向动态过渡，以及化学科学向其它科学渗透，在其它科学中的特殊作用等等一系列新特点，化学科学更加鲜明地体现了人类的伟大创造力！

王 勉 之

4.化学科学的分类

化学在现代科学中有其特有的地位和作用，无论是理论上还是实践上都是如此，前文已有陈述。这里进一步讨论化学科学的分类问题。

化学分类反映化学科学的对象和体系的内部结构，是为了深入研究化学而采取的一种基本方法。目前还沿用着传统的化学分类，但是由于现代化学的发展，内容不断丰富和更新，形成许多新的分支学科。为了适应这种新的变化，人们在探索新的化学分类方案。近年来国内外提出了各种不同的见解，尚未取得统一。需要有一个合理的、为大家可以接受的、符合化学发展实际的分类方案。

化学分类的历史考察

人类在长期实践过程中产生了对化学物质分类的要求。这可以追溯到古代。我国东汉（公元一世纪）的医药简牍，把一百种药物分为植物药、动物药、矿物药及其它。九世纪时阿拉伯的炼金术士扎比尔，曾把矿物分为三类：精英、金属体与矿物体。公元十世纪时，拉齐把物质分为四类：植物性的、动物性的、矿物性的以及衍生的。对其中的矿物，拉齐又分为六类：物体、精素、石类、矾类、硼砂类、盐类。十至十一世纪，阿拉伯学者阿维森纳在《医典》中把矿物分为四类：石、可熔物、硫、盐等。十六世纪，德国冶金家阿格里柯拉把矿物分为五类：土类、石类、固化浆类（矾、盐等）、金属类与混杂物类。

上述分类虽然不断有发展变化，但都是对自然界的物质或对化学物质（主要是矿物）从表面的物理性质上划分，涉及到了化学分类问题，是原始的化学分类方法。十七世纪化学成为科学，才逐渐形成了化学本身的分类。自从波义耳提出“定性检出极限”的概念后，分析检验化学物质由重视物理性质发展到重视化学性质，形成了初步的定性分析，为近代分析化学作了准备。十八世纪中期发展出定量分析。十八世纪后期，欧洲的采矿、冶金、机械等工业大发展，要求以矿物、岩石、金属等为主要对象进行化学分析。1829年，德国化学家罗塞制订了系统定性分析法，从此分析化学成为系统的科学知识。

十八世纪末，在葛伦发表的《自然哲学》中，单独分出一章有机化合物，这是区分无机化合物和有机化合物的最早开端。这时有人把酸区分为矿物酸、植物酸和动物酸三类。说明当时有了矿物化学、植物化学和动物化学的区别。当后来发现植物界与动物界存在某些相同的化合物时，认识到植物与动物的化学没有原则区别，于是化学分为无机化学和有机化学的见解得到广泛承认。

物理化学在十八世纪中叶首先由俄国著名学者罗蒙诺索夫提出。他指出：“物理化学是一种科学，根据物理学的原理和实验来说明复杂物体中，通过化学程序所发生现象的

原因。”① 并且著有《物理学概论》。H. H. 别开托夫于1865年讲授物理化学课程。② 以后西欧的化学家奥斯特瓦尔德和范霍夫于1887年合办《物理化学杂志》，并发表了几篇著名的文章，“物理化学”才渐渐被人们承认。从此化学的四大门类先后形成。到十九世纪末，化学的四大类已有很大发展。历史证明，化学分类的方法起了积极作用。这一时期的化学主要是在宏观方面取得了成果，已为化学发展的历史所决定。

十九世纪末二十世纪初，由于物理学开始攻入微观世界，随之化学也进入微观领域。许多化学分支在传统的基础上，把宏观研究与微观研究结合起来，从深度和广度两方面向前发展。同时由于与化学相关的其它学科的发展涉及到更多的化学问题，如物理学、生物学、天文学和地学等无不与化学交织在一起。特别是五十年代以来发展起来的各种尖端科学、国防科学及工业生产等方面的需要，对化学提出多方面的要求，促使化学的发展日益深入，越来越细，从而增加了许多新的化学分支。如：稀有元素化学、络合物化学、核化学、放射化学、高分子化学、表面化学、催化化学等等。同时化学又与其它学科多方面交叉渗透，也增加了许多新的化学分支。例如：生物化学、元素有机化学、量子化学、结构化学、天体化学、地球化学等等。自从1977年普利高津由于耗散结构理论获化学诺贝尔奖起，化学又开辟了远离平衡态的全新领域，人们期待着更多的成就。化学这种广泛而深入的发展状况，导致传统的化学分类已不能很好地适应了，需要改进。分类方法本来是区分事物的基本方法，有助于对客观事物的认识。当某种分类方法与客观事物的发展不相适应时，应当及时修改，以便方法更好地为认识事物的目的服务。这样至少有四点好处：（1）对现代化学究竟有多少门类，不是给人以模糊的概念，而是有一个清晰地了解。同时对新发展出来的为数众多的化学分支之间的相互关系，也可以有明确的隶属系统。（2）一个合理的化学分类系统，可为高等学校化学系的课程设置提供改革依据。（3）为按比例培养各类化学专门人才提供合理的参考。（4）对于科研单位的设置及研究方向的选择，也有参考价值。有利于更好更快地出成果，为四化建设服务。

各种化学分类新方案及其评价

近来国内外对化学的分类有各种不同的方案，列举如下。

第一种，把化学分为五大类：（1）构成化学，（2）反应化学，（3）物理化学，（4）理论化学，（5）应用化学。③

第二种，也是分为五大类，但分类内容不同：（1）分析化学，（2）合成化学，（3）结构与性能，（4）化学动力学，（5）理论化学（量子化学）。④

第三种，分为六大类：（1）结构、性能与鉴定，（2）合成化学，（3）化学动力学，（4）液态、固态与表面，（5）理论化学，（6）核化学。⑤

第四种，分为八大类：（1）结构、性能与鉴定，（2）合成化学，（3）化学动力学，（4）液态、固态与表面，（5）理论化学，（6）核化学，（7）仪器化学，（8）热力学。⑥

---

①、② 卡布路考夫著：“物理化学与胶体化学”，商务印书馆，1953年，原序。

③ 张孟军：“关于自然科学技术前沿的探讨”，《国外科技动态》，1980年，第6期。

④、⑤、⑥ 王祖陶：“现代化学发展的特点及趋势”，《化学通报》，1983年，第2期。

第五种，美国《化学文摘》的分类，（1）生物化学，（2）有机化学，（3）大分子化学，（4）应用化学，（5）物理化学及分析化学。

第六种，日本《科技文献速报》的分类，把基础化学分为五大类：（1）物理化学，（2）分析化学，（3）无机化学，（4）有机化学，（5）高分子化学。

这些五花八门的分类方案说明大家正在寻求一个合理分类，同时也说明在化学分类问题上比较混乱，见解还很不一致。第一种分类方案改变较大，列类新颖，完全摆脱了传统化学分类的框框，力图反映现代化学的发展。然而仔细分析起来仍有不妥之处。

第一，关于构成化学。提出者的意图似乎是主张取消无机化学、有机化学和分析化学，通过构成化学专门研究化学物质的组成、结构和性能。通过反应化学研究化学物质变化的各种有关理论。从化学物质构成的观点和反应的观点考虑问题，形成不同的两大类，把有关的理论系统化。同时关于结构与组成的鉴别与测定方法也应包括在内。这样原来无机化学、有机化学和分析化学的有关内容均可涉及，有其可取的一面。但是，按此方案改变的结果，学科的内容体系需要根本改变，涉及的变动面太广，各种资料、文献、教材的连续性发生中断，突然发生大的变动，不易为人们所接受。

第二，物理化学与理论化学不必分为平行的两大类。物理化学是物理学的理论、实验与化学结合、渗透的结果，是关于化学的理论。过去长时期对物理化学与理论化学不加区分，常常看成是同义语。近些年来由于量子化学的发展，有些学者提到理论化学时专指量子化学。而量子化学从广义方面考虑也是物理学与化学的结合，仍属物理化学这一大类。无须在大类中平行列入物理化学和理论化学两大类。如果从物质运动形式的观点和系统的观点考虑问题，量子化学属于物理化学这一大类中的一个重要分支则更为合理。

第二种分类方案中，分析化学沿用传统学科名称，这已经不能很好地反映现代化学在这方面发展的全部内容了。沿用老名称有些勉强，形式和内容不相吻合，这是其一。其次，取消无机化学、有机化学和物理化学三大类，列入合成化学、结构与性能、化学动力学和理论化学（指量子化学）。这样突出了几个重要方面，但不够全面。而分类的要求是力求全面。“合成化学”不可能包括无机化学、有机化学的全部内容。而结构与性能、化学动力学和量子化学也未能包括物理化学的许多重要分支的内容。因此这种分类方案也不宜选取。

第三、四两种分类基本是一个类型。第三种分类虽然把化学分为六大类，但并不全面，不能把现代化学的主要方面都包括在内。同时“结构、性能与鉴定”这样的学科名称也欠精炼。第四种分类方案为了弥补第三类的不足，又增加了两类。这样平行列入八大类又失之于过多。就是八大类还不能全面包括和表现现代化学的各个分支，也就是说在表现连续性和现实性方面均感不足，因此这两种分类方案也不可取。

第五、六两种分类是根据论文类型加以划分，虽然不是专门的分类，也均有其参考意义。

这种分类上的混乱，一方面说明化学分类要求打破原来的四大门类，另方面也说明缺乏统一的分类原则。

化学分类的基本原则

化学分类是深入认识化学现象的一种基本方法。要想使分类符合实际，应当遵循以

下基本原则：

（1）物质运动形式是分类的基础。这个问题恩格斯有过精辟论述："每一门科学都是分析某一个别的运动形式或一系列相互关联和互相转化的运动形式的，因此，科学分类就是这些运动形式本身依据其内部所固有的次序的分类和排列"①。这个原则适合于科学分类，也适合于化学分类。这段话有下面几层意思。第一，说明自然科学以物质运动形式为客观基础。自然科学的对象是运动着的物质、物体，而"运动着的物体的性质是从运动的形式得出来的。"② 每一门自然科学都是分析一种物质运动形式的，这是反映了物质运动的特殊矛盾。"科学研究之区分，就是根据科学对象的领域所具有的特殊的矛盾性，因此，对某一现象的领域所特有的某一矛盾的研究，就构成某一门科学的对象。"③ 第二，反映了物质运动形式变化发展的复杂性，即反映了物质运动形式的矛盾由低级向高级的发展的一系列互相联系和互相转化的关系，说明物质运动形式不是静止、孤立的，而是在运动中彼此转化发展的内部关系。第三，说明科学的分类不是主观的，而是依照运动形式内部固有次序的分类和排列。它是不依人的意志为转移的。它既反映了自然界物质表面的区别与联系，也反映了内在的转化关系。

现代物理学、化学、生物学的成就，证明和丰富了恩格斯的上述论断。现代化学从微观和宏观两个方面深刻地揭示出运动形式的内在联系。对微观客体运动规律的揭示和认识，往往是物理学首先突破然后联系到化学方面。如化学键理论揭示了化合物性质的本质，量子化学和结构化学从微观结构上解释了化合物性能的特点，以及对化学反应的精细认识。微观物理学和化学的发展，更深入地揭示了生物现象的化学基础。这些新的成就无不说明一系列互相关联和互相转变的运动形式的固有关系。这些复杂的关系和不同的方面，成为化学分类的客观基础和分类原则。但是仅有这一条原则还不够，还必须有以下两条原则作补充。

（2）连续性原则。即在化学分类上应考虑知识内容的连续性问题。化学知识的发展有其历史的逻辑的一致性，连续性原则与此相符合。完全改变原有化学分类方案，不考虑连续性，与认识的发展规律相违背。

（3）发展的原则。即能够反映现代化学发展的复杂情况，更新过时的内容，把形式和内容统一起来。完全墨守陈规，不论化学怎样向前发展，也不改变原有的分类方法，这是一种静止的观点，不符合化学发展的实际。

多层次的化学分类系统

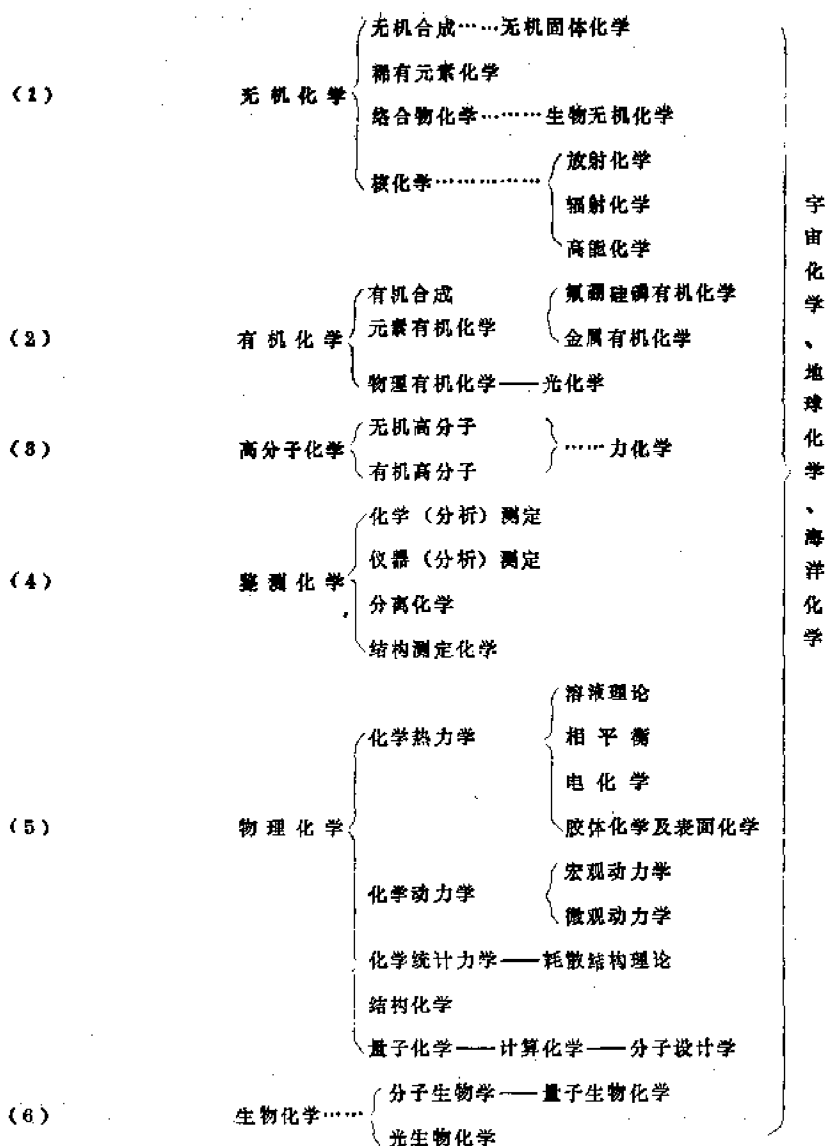
根据上述三条原则，我们提出一个多层次的化学分类系统，以便对化学的现状给以充分地表达。见下页表。

这个分类系统共分三个层次。第一个层次是六大类，比传统的分类增加了两大类。六大类反映现代化学发展快、新、多的现状。因此在划分大类时，完全墨守原来的四大类不能充分反映现代化学的状况，应该有所改变。这六大类中保留了传统的无机化学、有机化学、物理化学等三个门类。尽管现代无机化学与有机化学的发展，通过络合物、

---

①、② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，227、226页。

③ 《毛泽东选集》第二卷，人民出版社，1952年，775页。



金属有机化合物抹去了无机化学和有机化学的界限，但是典型的无机和有机化合物还是大量的，无机化学与有机化学基本上未失去其存在的意义，可以继续保留。

高分子化学单独列为一大类。高分子化学起初属于有机化学的第二个层次，由于碳纤维化学的出现并受到重视，高分子化学包括了无机的和有机的两个方面。高分子化学在近四十年来突飞猛进，占有重要地位，成为人工合成化学物质的主要方面，发展前途广阔，如果归入无机化学类或归入有机化学类都不恰当，有必要单独列为一大类。

在高分子化学发展的同时，为了研究高聚物在机械力作用下的化学现象和化学过程，或者是研究在机械力作用下的化学转化问题，在高分子化学与力学之间产生了一门新兴科学——力化学。它有着重要的现实意义和哲学意义。在固体物理、物理化学、生物学及生物化学等一系列共同问题上打开途径，又一次反映了各种运动形式之间的内在联系。因此，在高分子化学类的第三个层次上列入力化学。

生物化学在化学中应当是独立的一大类。当前生物化学的发展有着极为诱人的魅力。生物化学自从五十年代进入分子水平，特别是六十年代以来生物化学的内容在化学方面更为突出，进一步反映了化学运动形式与生命运动形式的深刻关系。化学从多方面对生物学问题进行深入细致地研究，应当说这还是非常初步的，但有着美好的前景，它是现代化学的一个十分重要的方面。所以，生物化学应当列为一大类。但是过去在化学分类中并未列入生物化学。往往把生物化学归入生物学方面，许多高等学校生物化学是生物系教学计划中的必修课程。这个事实说明过去生物化学的主要方面从属于生物学。这样划分有其历史原因。远在十七世纪初，范·海尔孟深信酵素参与维持生命的反应过程，接触到生命与化学的关系问题。十八世纪时普利斯特列等人探索植物的光合作用，拉瓦锡等人对动物呼吸的研究均涉及到生物化学问题，但并未认识到这类工作应属生物化学。1842年德国化学家李比希所著《生物化学》一书出版，把化学与生理学结合起来，使化学家相信化学能够解决生理学问题。虽然书名叫生物化学，但与现代生物化学有很大不同。十九世纪末二十世纪初，生物化学才成为名符其实的生物化学。研究生物体的化学成分，必须应用化学的方法研究生命物质的化学成分、性质和结构，阐明生命过程的化学本质，以及化学过程与生理机能相联系的规律。尽管生物化学已经有了愈来愈多的化学内容，由于传统的影响，生物化学在化学系统里尚未摆到应有的地位。二十世纪五十年代，脱氧核糖核酸双螺旋结构的被肯定，之后生物化学受到化学家的空前重视，在化学分类中不列为一大类是不现实的。

用鉴测化学代替分析化学的名称，并列为一大类，能够充分地反映现状。

分析化学在分类中如何对待是意见分歧比较大的一个问题。有的主张分析化学只是一种分析手段，不必列为一大类。有的主张用仪器分析等名称代替，有的主张分析化学是一大门类，名称不能改变，更不能取消。究竟如何对待分析化学在化学分类中的地位，笔者认为可从分析化学的发展中得出正确结论。

分析化学从十七世纪开始到十九世纪二十年代发展成一门科学。实际上分析化学在形成之时及以后的一段时间里是化学分析。自从十九世纪二十年代英国人塔尔波第一个把某一特征光谱线和某一定物质的存在，这两种现象联系在一起，到1854年美国人阿尔特正式提出光谱分析的建议，开创了仪器分析。本世纪三十年代后，工业生产及科学技术的发展对分析化学提出越来越高的要求，例如微量、痕量组分的测定，超纯材料的制取等要求促进下，许多新的鉴别技术发展起来，丰富了现代仪器分析的手段。由于原子能工业、石油化工及生物化学等方面发展的需要，使一系列分离技术获得发展，例如萃取、蒸馏、离子交换，色层、共沉淀等技术，形成一门分离化学。在化学键电子理论、分子轨道函数理论的影响下，以及在光、电、磁原理为基础的物理实验技术的影响下，许多测定分子结构的方法，如分子光谱法、分子旋光性测定、光电子能谱、γ射线共振荧光谱等相继出现。对晶体结构测定技术也有很好的发展，如X射线衍射法测晶体结构、X射线粉末法测多晶体结构、电子衍射测薄膜或固体表面结构、中子衍射测微观结构等，建立起晶体构分析。这样，在现代化学中从经典的化学分析发展出仪器分析、分离化学和结构测定化学等三个新的分支，组成现代分析化学的全部内容。分析化学这个传统的名称与其所包括的内容已不相适应了。虽然仪器分析和分离化学还是在化学分析基础上进行的，如试样的溶解、干扰物质的分离等都是化学分析的基本步骤，同时

仪器分析大都需要化学纯样品作标准，而这些化学纯品的成分还需要依靠化学分析来确定。这些正好说明现代分析化学与本来意义下的分析化学有了很大区别，同时还有一定的联系，否则不能属于化学。

综上所述说明分析化学有了很大发展，应当列为一大类。同时也因为它发展出许多新内容，仍用“分析”二字已不能包括全部内容。所以，笔者认为分析化学改称鉴测化学为宜。“鉴”即鉴别各种成分，包括分离技术在内，“测”是指结构的测定。这样，鉴测化学就可在第二个层次上包括化学分析、仪器分析、分离化学和结构测定等四个分支。鉴测化学是分析化学演变的结果。

鉴测化学虽然是手段性学科，但是它仍以化学反应为基础或与化学反应有密切关系，属于一种受化学反应所制约的学科。这与前述分类三原则相符。

核化学归在无机化学的第二个层次上。这主要是由于无机化学中关于元素的制备及性质的研究，在传统上属于无机化学的领域。元素的嬗变是通过核反应进行的，属于核化学的主要内容。从元素变化的观点上讲，核化学应属无机化学类。正因为核反应有其对象的特殊性，才成为一门独立的分支学科。按其在现代化学中所处地位，虽然在能源、医疗等方面都很重要，但是还比不上高分子化学那样广泛而深入的发展；也不及生物化学那样与生命现象直接而密切的关系，并与分子生物学一起成为带头学科的重大意义。因此，核化学不单独列为一大类，归在无机化学的第二个层次上，比较符合当前核化学在化学中所处的实际地位。

在物理化学这个大类中，结构化学探讨物质的微观结构以及它和宏观性能之间的相互关系，是物理化学中的新的重要分支。量子化学毕竟是物理学与化学的结合，归入物理化学的第二个层次上是理所当然的。耗散结构理论归在物理化学的第三个层次上，主要是考虑该理论的出现是物理化学发展中的一个重要方面。它是远离平衡区的非平衡态理论，是一个新的有意义的领域。普利高津通过对溶液理论、化学平衡、热力学、化学动力学、统计力学及其它方面的广泛研究，于1969年正式提出关于耗散结构的论文，从而“导致理论物理和理论化学大多数领域都存在着概念重建问题。”① 这是化学也是物理学的一个新起点。

上述化学分类系统的学科门类由少到多，即在第二、三层次上大大超过第一个层次上的学科数量。这种情况反映了化学的综合与细分愈渐增多。在第二、三层次里学科间的相互渗透也多起来，符合前述分类原则。反映了化学运动形式与机械运动、物理运动、生物运动之间的相互联系，反映了宏观与微观的相互联系，反映了人类对化学世界认识的深入程度。

在划分六大类后，还必须提到三类不可缺少的与化学直接有关的综合化学，这就是宇宙化学、地球化学和海洋化学。宇宙化学近十多年来发展很快，对星际分子的认识有了很大发展。既有无机分子又有有机分子，同时还需要计算化学的计算。地球化学研究地质过程的化学作用，化学元素原子的迁移、聚集和分散规律的科学，对于人类的生存问题有现实意义。涉及到无机化学、有机化学、鉴测化学及物理化学等学科。海洋化学主要研究元素在海洋中的含量、分布及转移等。海水是一个变化着的化学体系，极其复杂，

---

① 湛垦华、沈小峰编：《普利高津与耗散结构理论》，陕西科技出版社，1982年，V页。

千变万化，涉及到海洋水圈、大气圈、生物圈、沉积圈及各边界圈的问题。对化学来说涉及到无机化学、有机化学、鉴测化学、物理化学及生物化学等许多学科。

这三门不同的综合学科不能与前述的六大类并列，也不能归入任何一类的某一个层次，而是纵贯六大类的综合学科。在分类系统表上排在右侧。

合理的化学分类将有助于进一步对化学世界的认识。应当看到，化学分类不是一成不变的，它是发展的，同时又有其相对稳定阶段以适应化学的现状，促进化学的发展。

张 家 治

5. 化学科学理论性问题的哲学解释

化学科学理论性问题的哲学解释，实质上是化学哲学问题的哲学答案。

理 论 的 层 次 性

有人认为，化学是一门传统的经验科学，特别是与物理科学相比较，它没有什么理论；或者说化学主要是一门实验科学，理论性不强。有趣的是，抱有这同一观点的人们却分成了两个相对立的派别，一派人强调，通过物理科学和化学物理学这样的边缘学科，化学的“理论地盘”完全被物理学占领了，因此化学最后可以归结为物理学，现行化学的理论完全是物理学理论的“衍生物”；另一派人则否定量子化学是化学的基础理论。更为有意思的是，前者被后者称为“大物理主义者”，后者则被前者叫做“经验化学保守主义者”。前者多是搞物理的（特别是搞理论物理的）或者搞量子化学的，后者大半是搞实验化学的。笔者认为，有必要从哲学高度来集中解释化学科学的理论性问题。

什么是理论呢？一般而言，这是个哲学问题。理论总是相对于实践而言的，即理论与实践是相对区分的，它们之间没有绝对的界限。理论可以按照适用范围的广泛性来划分层次。作为自然科学和社会科学总概括的哲学理论是第一层次的理论，即最一般性的理论；自然科学理论和社会科学理论则是第二层次的理论，即适用范围比较小一些的理论，或者说是比较具体点的理论。自然科学总论相对于它的各门具体的学科理论，或者社会科学总论相对于自己范围内的各门具体的学科理论来说，总论则上升为最一般性的理论，而各门具体的学科理论是次一级的。例如量子力学就是第三层次的理论。各门具体的基础学科，一般说来都分为理论性比较强的部分和应用性比较强的部分。比如，物理科学分为理论物理和实验物理，经济科学分理论经济学和应用经济学。这两部分之间也是相对区分的，同样没有绝对界限。理论物理不可能脱离实验物理，实验物理本身也不是一点理论都没有。特别是在技术科学化和理论化的今天，物理实验技术本身的理论性也很强。理论物理学家侧重搞理论，实验物理学家侧重搞实验，这仅是科学分工而已，当然这是发展科学事业所需要的分工。就上述意义来说，化学作为一门基础自然科学当然有自己的理论。但是，一说理论物理，不管人们理解得深浅如何，总以为这是自然而然的事情；若提起理论化学，许多人就觉得非常陌生。

相对于第三层次的量子力学理论来说，量子化学则是第四层次的理论，因为量子化学是运用量子力学的理论原理和方法来处理化学理论问题的。但如果因此得出结论说化

学本身根本没有什么理论可言，这是“大物理主义”的观点，是不符合事实的。因为化学有它本身的特殊理论问题，例如化学反应速度理论，它是量子化学理论的前沿研究阵地之一，它的深入发展必将丰富和深化量子力学的理论。又如自洽场分子轨道理论是量子化学的另一重要内容，它是从自洽场原子轨道的量子力学理论推广发展起来的，但现在反过来对量子力学的固体能带理论产生了深远的影响，用分子轨道理论的观点来研究固体能带结构，已取得了一些有意义的成果。总的说来，量子化学对于量子力学来说有一个应用与原理的关系，应用者的理论性自然就是次一级的。这里所说的主次、高低的概念，并不是重要和不重要的意思，而是理论层次问题。如果我们把量子力学作为理论物理深度发展的一个阶段(或者里程碑)，那么量子化学则是这个深度发展阶段的广度发展。

一般说来，理论的深度发展是开拓前进道路的，理论的广度发展是扩展理论的应用范围的。深度发展和广度发展也是相对区分的，两者之间并没有绝对界限。量子化学相对于量子力学这个更大，更高的理论层次来说，它就是小一级的，或者说是低一级的理论层次；相对于化学领域来看，量子化学则是化学理论的深度发展的一个阶段。无机化学、有机化学、配位体化学和高分子化学等各个化学分支学科对于量子化学理论的应用，又变成量子化学理论的广度发展了。这样看来，理论层次之间的辩证关系是比较明显的。不难理解，我们不能把作为广度发展的量子化学看成是不重要的。事实上，量子化学具体解决了量子力学本身不能解决的许多问题，并且反过来促进了量子力学的发展。那种贬低广度发展的观点是不对的。

如果考虑到量子化学并不是化学理论的唯一发展方向，那么上述观点是否同样适用于化学热力学、化学动力学和化学统计力学的发展情况呢？答案是肯定的。一方面，它们是应用物理理论和方法的产物，因此是物理理论的广度发展，对于化学来说则是深度发展；另一方面，它们正在量子化学化。

看来，在对待化学科学的理论性问题上，“大物理主义”在认识论上的毛病是轻视理论的广度发展；“经验化学保守主义”对理论的深度发展则多少抱有成见。

从经验科学向理论科学过渡的理论判据

许多人认为，化学科学目前正处于从经验科学向理论科学过渡的阶段，还没有完成。

前面对理论层次问题的阐述表明，仅就某一门科学的理论性问题而言，本身就是个哲学理论问题，单在这门学科的范围内打转转是得不到合理答案的。究竟什么是经验科学，什么是理论科学？两者同实验科学又有什么关系？这些更是哲学理论问题了。

恩格斯在《自然辩证法》一书中使用过“经验自然科学”这个提法，并且从自然科学的整体角度论证他那个时代的自然科学“从经验科学变成了理论科学”[①]然而，具体到各门基础学科从经验科学上升为理论科学的标志问题是悬而未决的。

有时人们把“定性描述”做为经验科学的特征，把“定量研究”作为理论科学的标志，从而认为一门科学由定性描述为主的阶段过渡到以定量研究为主的阶段，就是从经验科学上升成为理论科学了。然而定量研究是有历史水平之分的，某种历史水平是否使

① 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，175页。

某门科学达到以定量研究为主的阶段？有时是很难判定的。

原子量和分子量的定量研究，是否使以原子分子论为理论基础的近代化学达到了理论科学的程度呢？恩格斯时代的化学已是近代化学，他高度评价过关于原子量的定量研究工作对于化学科学的意义，“在化学中，特别是由于道尔顿发现了原子量，现已达到的各种结果都具有了秩序和相对的可靠性，已经能够有系统地、差不多是有计划地向还没有被征服的领域进攻，就象计划周密地围攻一个堡垒一样。”① 恩格斯认为，原子论开创了化学的新时代，近代化学之父是道尔顿，而不是拉瓦锡。恩格斯对原子论的这些评价，当时都是具体针对比较电学领域的情况而言的。他说，电学还处于一种“支离破碎的状态，暂时还不能建立一种无所不包的理论，正是这一情况使得片面的经验在这一领域中占有优势。这种经验竭力要自己禁绝思维，正因为如此，它不仅是错误地思维着，而且也不能忠实地跟着事实走或者只是忠实地叙述事实，结果就变成和实际经验相反的东西。”② 现在看来，应当重新考虑恩格斯对电学领域的理论成就的评价问题，因为他没有提到麦克斯韦电磁理论的作用。但这不是本文的任务。重要的是，从这里可以看到一个问题：恩格斯是否认为他那个时代的化学已经从一门经验科学变成理论科学了呢？笔者认为，假定他对电学的评价是正确的，相形之下，当时用原子理论武装起来的化学，若说它从经验科学变成了理论科学，这是不过分的。

有人认为，“经验的”和“实验的”是两个完全不同的概念。当然，经验和实验是两个不同的概念。一个根本不搞科学实验的人，当然不能因此而说他是一个根本没有任何经验的人。经验是比实验广泛得多的概念。笔者认为，在科学研究领域内，经验和实验不仅不是两个完全不同的概念，而且是关系极为密切的概念，甚至在很多情况下可以等同看待。显然，科学实践中的经验事实有很大部分就是实验结果。在恩格斯对电学的评语中所多次提到的经验概念，笔者以为实质上就是实验概念。他说：“在电学中，只有一堆陈旧的、不可靠的、既没有最后证实也没有最后推翻的实验所凑成的杂乱的东西，只有许多孤立的学者在黑暗中胡乱摸索，从事毫无联系的研究和实验，他们象一群游牧的骑士一样，分散地向未知的领域进攻。”③ 不管这样评价是否确切，笔者认为这里所说的实验和上面引语中所说的经验是等价的。

有人认为，更确切地说化学“由经验科学向以实验为基础的理论科学的过渡”，似乎这样就可以判定：“化学由经验科学向理论科学过渡的开始，是以1927年海特勒-伦敦处理氢分子这一工作为标志的”④。即是说以量子化学的诞生为判据。人们不禁要问：以原子分子论为理论基础的近代化学是不是“以实验为基础的理论科学”呢？看来，把经验和实验视为两个完全不同的概念，对于回答这类问题也是无济于事的。

由于对科学理论问题的看法和理解不同，不仅在原则上有分岐，并且在同一主张的划分标准上也有很大分岐。

究竟什么是科学理论呢？有人从模型和模型方法的角度加以定义，“如果把一些普通原理和逻辑方法应用于模型，建立起模型自身的系统，揭示出模型与它所表现的那部

---

① 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，95页。
② 同①，96页。
③ 同①，95、96页。
④ 杨頫，“化学从经验科学向理论科学的过渡”，《中国自然辩证法研究会通信》，1981年第14期。

分物质客体的必然联系，并能用来说明相应那部分外在世界的现象和规律，这种知识就称为理论。”[1]由此并得出结论说：“模型和模型方法在促进化学从经验科学向理论科学的转变中具有重要作用。”[2]问题在于，模型和模型法也有历史水平之分。近代原子分子理论也是有模型的，也是运用了模型方法的，这里的模型也离不开普通原理和逻辑方法，只不过是水平不同罢了。看来，用这种理论定义，并不能断定恩格斯时代的化学是否变成了理论科学，同样也不能认准量子化学是化学向理论科学过渡的开始。

有人认为，近年来分子设计学（或分子工程学）的出现，是化学“从经验性的、半经验性的科学向理论性的科学阶段过渡”的标志[3]。显然，这种观点不同意把量子化学的诞生做为过渡的判据，为什么呢？持这种主张的同志说：“化学自从十九世纪初跨人近代化学以来，到现在为止已有一百七十多年的历史。在这一段时间内，它虽然相继建立了原子论、分子论、元素周期律、原子结构、分子结构和量子化学等几大理论基础，但是，仍然还没有完全从经验性或半经验性的发展阶段中摆脱出来，实验中的盲目性仍然比较大，缺乏有力的理论指导，往往需要人们在长时期的大量实验中去探索，事倍而功半”[4]。这里所说的合成化学实验现状和合成化学的“经验选择”性相吻合，但问题在于：究竟以何标准来判定一门科学完全从经验性和半经验性的发展阶段中摆脱出来？笔者认为除非不用实验了（或者说只用一次实验就能保证成功）才能做到这种完全的地步。要进行实验（或者说要进行两次以上的实验），就不能完全摆脱经验选择性。“根据人们的意愿在化学理论的指导下，设计出规定结构和性能的各种材料及其合成路线，尽量摆脱‘配方’、‘炒菜’的传统筛选方法，‘定做’出指定性能的新材料和化合物。它将使化学日益摆脱人们在寻找新材料，合成新成品中的盲目性，而有可能根据产品性能的要求，预先进行分子结构和合成的设计，然后根据设计方案有指导地加以实验，从而大大减少失败次数，提高化学实验的成功率，早日得到预想的新产品。”[5]即便达到这种分子设计的理想水平，也只能大大减少实验的次数，但不能减少到一次成功的地步，“成功率”的统计底数至少要求有两次以上的实验。这样，经验选择性不能完全免除，人们究竟到什么地方去寻求完全理论性（即完全摆脱了经验性）的美好境界呢？

不论在结构化学方面，还是在反应化学方面，要想使量子化学理论完全摆脱经验性看来是根本不可能的。人们只能做到不断增强理论性，而减少经验性。

如果将来有朝一日，理论计算化学确实把常规实验化学降低为“一次验证者”的角色，那么就可以说分子设计学和分子工程学把化学完全从经验中解放出来了。因为常规化学实验能一次证明理论设计的正确性，所以用不着实验探索了，从而也就根本排除了经验选择性。如何向这一理想目标迈进？是通过加强常规实验，还是逐渐减少常规实验的途径呢？由于对理论化学和化学的理论性问题的看法不同，对实验和经验概念的理解不同，导致不小的意见分歧。有人认为理论计算化学现已担当了“理论化学方面的主攻任务”，有人主张加强常规实验的作用；有人强调理论实验和常规实验的相互配合。因此，弄清楚从经验科学向理论科学过渡的判据问题，不仅富有重要的哲学意义，而且具有如何发展科学的战略意义。

---

①、② 杨频：“化学从经验科学向理论科学的过渡”，《中国自然辩证法研究会通信》，1981年第14期。

③、④、⑤ 廖正衡、盛根玉：《化学辩证法问题初探》，人民教育出版社，1980年，68页。

科学理论性是一历史性概念，科学理论是有历史水平之分的。就化学科学而言，笔者认为：以原子分子论为理论基础的近代化学就开始把化学变成理论科学了；以量子理论为基础化学的理论性提高到一个新的历史水平；以理论计算为基础的分子设计学表明，有可能使化学的理论性发生一次质的飞跃。因此，从经验科学向理论科学的过渡也是有历史阶段之分的。依不同的历史阶段而不断过渡到一个一个新的理论里程碑，这是哲学性的理论判据问题。

解　强

（三）化学科学的地位和作用

1.化学在科学体系中的地位和作用

化学在科学体系中的地位和作用不是一成不变的，而是经历了一个发展变化的过程，在不同的历史时期化学的地位和作用也在改变。大致可分为三个时期来考虑：十六世纪前，十七至二十世纪，以及二十世纪后。以下我们分别加以讨论，重点放在第三时期。

十六世纪前，古代与中世纪

在古代，除了数学、力学和天文学具有一定程度的相对独立性外，科学并没有分化，没有物理、化学、生物学等学科，就是科学作为整体也与哲学结合在一起，统归于自然哲学。尽管如此，我们还是可以简略谈谈当时意义下的化学在当时科学体系中的地位和作用。当时自然哲学的一个特点，是在非常有限的经验资料的基础上建立整个自然的变化发展的图景，化学也不例外。在远古时期，人们使用天然金属如陨铁，他们就设想既然陨铁是从天上掉下来的，那么天就是一个大铁盘。后来又认为天上的星体是与地上的各种金属联系在一起的，太阳最亮，力量最强，自然就掌管最贵重的金属黄金，然后循序而下，月亮掌管银，火星、金星、水星、土星依次掌管铁、铜、铅、锡等，在不同时期又有所变化。进而又认为大的天上的星宿与小的地上的物体一一对应，大的称为大宇宙，小的称为小宇宙。大小宇宙不可分刈，一个发生变化，另一个也会相应发生变化。这些是炼金术士对当时天文学的想法。

到中世纪，科学与哲学都处于神学的统治之下，各种研究无不打上唯心主义和神秘主义的印记。在这一时期中，炼金术士和医疗化学家们提出了三要素，其思想体系是与古代四元素说一脉相承的，也与笼罩中世纪的思想体系相一致。化学在这种情况下，对医学、矿物学等产生影响。例如继承古代关于大宇宙与小宇宙的理论，认为在太宇宙中发生的变化会在以生物体为代表的小宇宙里重复发生，这样炼金术就对生物学、医学发生作用。当时就认为，既然炼金术可使贱金属变为贵金属，那么就一定能够使病体康复而痊愈。实际上炼哲人石与炼丹同是炼金术的任务。帕拉塞尔苏士就用炼金术来制备药物，从而大大修正了过去强调体液的医学理论，创建了医疗化学，为现代化学疗法奠定了基础。他的继承者们力图以化学术语例如中和反应来解释生命基础。医疗化学家们还推动了新药物的探索工作。另外，由于炼金要用到许多植物性物质和动物性物质，这样也就积累

了关于这些物质的知识。为了要炼金就要大量采集各种矿藏并作检验，这就推动了矿物学、地质学的发展。从以上对医学、矿物学等的影响中，从炼金术士所从事的所谓贱金属向贵金属的转化，炼丹与炼哲人石，提炼制取各种药物等等具体工作中可看到，这些工作总的特点都是试图改变物质的性质。这样从今天的眼光来看，他们的所作所为更多地涉及物质及其变化。在其它学科方面，虽然天文学家研究的天体与炼金术士的元素有某些联系，但天体是永恒不变的，天文学家并不试图（也无力）促使其转化。天文学家与力学家们一样，研究物体——而不是物质——的位移即机械运动。

总之，从古代到中世纪，化学的前身——炼金术和医疗化学，虽然它们的指导思想亦无科学可言，但是却在一个方面对科学的发展起到了作用。炼金术士和医疗化学家不是在书斋里去想，而是在矿山中，在药房里，在炉火旁操作，他们研究各种具体实在的物质及其变化；这就使人们逐步从在思想上追求世界的本原回到研究能触能闻能嗅能尝的具体物质，为以后波义耳提出科学的元素概念作了准备。

十七世纪至十九世纪末，近代

在文艺复兴的风暴中，哲学挣脱了神学的锁链，同时自然科学也逐步从自然哲学的庞大体系中独立出来。在科学内部原先相对独立的分支，如数学、力学和天文学在继续发展，其它学科，如化学、生物学、地学等也各自从自然科学的母体中脱胎而出，自然科学形成内部具有若干分支的状况。这一时期科学的分化是科学发展的必由之路。在科学的初期，科学必须由原始的综合发展到分化出若干学科，以分门别类地研究各自的对象。这样才能由原始浑沌的整体前进一步，开始积累有关各个部分各个环节的知识。因为中世纪的炼金术不仅从事物质的变化，也试图解释变化的原因，研究物质间因排斥吸引而发生的变化，在这一点上与力学有关。前面还提到炼金术与天文学的关系，例如天体、地球是由火元素、土元素等组成。炼金术还与治病密切有关。这样，化学就同时涉及力学、天文学、医学等学科。因而文艺复兴后化学逐步形成自己独立的体系，对于促使科学的分化起到重要作用。

天文学和力学继续研究机械运动。从伽利略到牛顿将天上的力学与地上的力学统一起来，达到经典力学的高峰。牛顿指出，他们工作的目的和方法就是要“从运动的现象去研究自然界的力，然后从这些力去说明其他现象”①。十九世纪，物理学家又以力学为样板和出发点研究热运动和电磁运动。经典物理学探索这些运动的规律，认为力是一切运动变化的原因。十九世纪著名物理学家亥尔姆霍茨写道：“物理科学的任务，在我们看来，……归根结蒂在于把物理现象都归结为强度不变的引力或斥力，而这些力的强度只与距离有关”。爱因斯坦和英费尔德指出，这正是经典物理学的特点②。生物学在当时很大程度上还处于描述与分类的阶段，随着解剖学的发展和显微镜的发明，描述的层次日益深入，到十九世纪末已经达到细胞与细胞核，并试图在此基础上阐明生物学的各分支。其它如地质学、数学等也朝着各自指定的目标前进。这是这一时期除化学外其它科学部门的大致状况。

---

① 牛顿：《自然哲学之数学原理》序言，商务印书馆，1935年。
② 爱因斯坦、英费尔德：《物理学的进化》，上海科技出版社，1962年，41页。

文艺复兴后，化学也逐步走向独立的道路。波义耳明确提出要把化学科学作为一门独立的科学来研究。他认为，化学不能只是从属制药、治病和转化金属。波义耳首先脱下蒙在化学身上使之不能健康发展的唯心主义外衣，在唯物主义基础上建立了科学的元素概念，从而奠定了化学以探索物质的奥秘为己任的正确方向。之后，化学家在研究各种化合物的相互反应时逐一发现新的元素，由确定它们在不同化合物中的比例推出定比和倍比定律。道尔顿在对气体研究以及定比、倍比定律的基础上提出了科学的原子论，稍后阿佛加德罗又提出分子假说。原子分子论极大地推动了化学的发展，使人类对物质的认识达到前所未有的深度。道尔顿原子论的提出使古希腊的原子论从猜测成为科学，人们不再认为原子是为了心灵解释的方便而提出的思辨的产物，他们承认原子、分子为实体以此来解释各种现象。最典型的例子是物理学在原子、分子概念的基础上建立了分子运动论和热力学理论。恩格斯在评价道尔顿的原子论时认为它“能给整个科学创造一个中心”①。

十九世纪在有机化学的研究中提出了化合价概念，以此来解释有机化合物的结构。同时，化合价概念又将化学家的目光引向原子内部，在原子中寻找价的物质承担者，设想原子具有结构或存在有较原子更低的物质层次。例如艾伦迈在1863年认为原子具有“亲合点”，其数字等于化合价②。法国化学家德拉伏在1845年进一步提出原子中存在有“次原子”，次原子数等于化合价，它们“具有亲合力，而且成对地结合在一起”③。普劳特在1816年提出所有元素均由氢元素组成的著名假说，化学家马里那克在1860年写道：“难道人们不能猜测这个原因，它是未知的，但或许有别于我们所认识的化学或物理力。它使单一原始物质的确定的原子团形成我们简单的化学原子，并赋于这些凝聚的原子每一个以特征和个性”④。门捷列夫的元素周期表不仅使化学趋于系统化，而且为二十世纪初建立正确的原子模型事先提供了依据，并从思想上启示了在更晚些时候建立基本粒子的“周期表”。

从以上极为简略的回顾中我们可以清楚地看到，自波义耳之后，化学坚定不移地在探索物质奥秘的道路上前进。化学家发现了越来越多的元素、化合物，研究它们的性质与反应，揭示了分子、原子的存在，预告了组成原子的更低物质层次，甚至还假定了它们的性质。这些都积累了关于微观物质内部组成与结构的知识，提出了启发性的思想和预言，为二十世纪科学革命作了必要的准备。罗蒙诺索夫在十八世纪就预言，“在物质的内部构造方面，如果有一天这个秘密被揭开的话，化学一定是它的先驱者，一定是化学第一个揭开自然殿堂的内幕”⑤。爱因斯坦和英费尔德指出：“在200多年的科学研究中，力和物质是理解自然的一切努力中的基本概念”⑥。二十世纪前，地质学和生物学虽然也涉及具体的物质，但这些物质都是宏观可见的，不涉及物质的基本组成与结构，因而实际上这两方面的任务就分别落在物理学家和化学家的肩上。物理学家和化学家分别提

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，96页。
② 希尔迪奇：《简明化学史》，英文版，1922年，56页。
③ 库兹涅佐夫：《前进中的化合价理论》，莫斯科，英文版，1929年，57—61页。
④ 转引自路易斯：《化合价》，纽约，1923年，19页。
⑤ 转引自斯吉柏诺夫：《人类认识物质的历史》，中国青年出版社，1958年，58页。
⑥ 爱因斯坦、英费尔德：《物理学的进化》，上海科技出版社，1962年，40页。

出能量守恒定律和物质不灭定律这并非偶然。化学在近代科学体系中的地位和作用是不容置疑的。

在这一时期，化学还影响、推动了其它学科的发展。虽然这一时期的化学受到牛顿力学、经典物理学的很大影响，但化学也通过各种方式推动了物理学的发展。例如前述原子分子论对物理学分子运动论和热力学的影响。各种化学电池及电化学更对电学作出直接贡献。化学电池为电学进而电磁学的研究提供了必不可少的稳定的电源，然后才有可能揭示电与磁的关系，最终发明发电机而获得更廉价的电力。法拉第的电解定律建立了电流与化学物质的联系，当时认为电是连续的，而化学物质却是不连续的，这就隐含了电的粒子性。十九世纪，化学还通过本生等人对元素光谱的研究影响天文学，使天文学逐步由只研究天体的运行而仅是作为数学和力学在天上的佐证的地位，发展到开始研究天体内部的组成。

在这一段时期内，化学也逐步介入生物学的领域。呼吸作用与氧化、燃烧的关系，光合作用之类似于还原反应，以及对发酵等等的研究均是明证。十九世纪上半叶有机化学突飞猛进的发展，证实天然有机物与无机物服从同样的定律。尤其是维勒人工合成尿素的成功有力地打击了生物学领域的活力论，大大推进了有关的研究。当时还流行“腐殖质理论”，这实际上是活力论的变种。著名化学家李比希坚决反对这一理论，他的工作创立了农业化学。李比希于1842年发表的名著《生物化学》，使化学家们深信化学是能用于解决生理学问题的。李比希等人开始将他们的工作与生物学家的工作真正结合起来，1897年毕希纳得到了酵母，从此化学家可以在体外用纯粹的化学方法来研究生理过程，从而标志独立的生物化学正在诞生，预示二十世纪化学向生物学的渗透之势将更为强盛。

从化学对其它学科的影响我们看到，化学逐步由相对独立的发展到十九世纪末与物理学、生物学、天文学等建立了联系。科学正在走向辩证的复归，由分化走向相互渗透、一体化。正如在这一时期初化学对科学的分化起过作用，现在化学也在一个方面开始对科学的一体化发生影响，这在二十世纪就更为明显。

总之在这一时期的开始之时，化学逐步从科学的怀抱里脱胎而出，从与其它学科的缠绕中理出自己的线索，从而在一个方面促使了各门学科的分化，推动了科学的发展。尔后，化学主要在探索物质奥秘的研究中在整个科学体系中发挥了作用，为科学革命作了准备。到这一时期结束之时，化学又逐步与物理学、生物学、天文学等结合起来，推动科学一体化的进程。

二十世纪后，现代

在本世纪之后，科学发生了前所未有的革命。科学本身，科学内部各分支的关系，以及化学在科学体系中的地位和作用都有了很大变化。

物理学在进入二十世纪后分为两支，一支接过化学探索物质奥秘的大旗，进一步研究原子核以及更深层次的组成与结构，另一支日益紧密地与化学结合起来。只注意力和运动而视物体皆为质点或刚体的物理学家，不再对以往由化学家研究的物质的组成与结构漠不关心。另一方面，埋头于研究复杂物质并力图与物理学划清界限的化学家①，开

① 李德：《化学中的幽默与人道主义》，英文版，1922年，233页。

始学习例如电磁理论以及量子论。化学家期待着物理学家的介入。娄里精辟地指出："因为分子如同原子必然具有电子的结构，所以很清楚，物理学家或化学家或更可能的是一个包括双方代表的集团，必须肩负起确定分子结构的任务"。罗伯森号召："物理学家和化学家联合起来"①。量子力学的建立标志着电磁运动理论经改造应用于原子结构，而量子化学又进一步表明量子力学经改进应用于分子结构。

国外有人认为，二十世纪以来化学家最重要的工作或许是将化学同科学的基础物理学结合起来。只有通过这种结合，我们才能弄清原子结构，弄清原子何以形成分子，以及众多复杂物质的结构与性质。在上一世纪，化学只知道在原子的水平上是什么在变化以及怎样变化，但不知道变化的细节，更不知道变化的原因。而现在他们不仅能在电子的水平上回答"什么"与"怎样"，而且能回答"为什么"，不仅知其然，而且知其所以然，这正是二十世纪科学发展的特点。在物理学家的帮助下，化学家汲取与改造了物理学理论，从而对科学事业作出贡献。

在物理学和化学的结合中，化学也对物理学尤其是凝聚态物理学、表面物理学等作出贡献.例如关于金属键、原子簇化合物的工作，以及有关催化的理论。放射性化学和近年来形成的奇异原子化学进一步加深了物理学家对核与基本粒子运动规律的理解。化学工业还逐步满足了对于各种特殊材料的需要，例如发展单晶硅等多种半导体材料，为超低温物理学提供超导材料，还有航天工业所用材料等。

本世纪生物学也获得很大发展，以遗传学为主流越来越深入到机体内部，寻找各种化合物，探索它们的组成结构和相互作用，由此来解释各种生命现象。化学在进入二十世纪后的主要倾向之一就是研究对象日益复杂而逐渐步入生物领域。在通往DNA双螺旋模型的三条主要线索遗传学派、生化学派与结构学派中，化学家起了很大作用。在理论上，化学家阐明了氢键的本质，在实验方面，勒温用温和的化学方法将核酸分解至核苷酸，为今后推断核酸的结构作了准备。查哥夫的工作则奠定了关键性的碱基配对原理。

分子生物学的形成也是化学、物理学向生物学渗透的结果。在本世纪初费歇尔就进行了关于蛋白质的一系列杰出工作。量子化学的形成与发展对从化学上研究生物大分子提供了理论基础。鲍林在四十年代末五十年代初提出蛋白质的α螺旋，以及上面提到有关核酸方面的工作，其它还有如对激素、维生素等等的研究。这些都使生物学的研究深入到分子水平，在五十年代初导致以提出DNA双螺旋模型为标志的分子生物学的建立，从而大大加深了人们对生命本质的理解。在生物学尔后发展的每一步脚印中都滴有化学家的汗水，凝聚着化学家的智慧与劳动。化学正在这方面发挥日益巨大的作用。从发展趋势来看，与其它方面的作用相比较，化学在科学体系中将在这一方面发挥更大作用。

目前化学家正在一方面深入从分子水平来研究生命运动，另一方面也逐步注意到各种化合物、器官之间的相互作用，注意到各级整体所表现出的功能。近年来化学家还对大脑中各种化合物的生理作用发生浓厚兴趣，这不仅对生物学，而且将对与研究意识有关的学科发生影响。人工合成生命以及对生命起源的研究，不仅将填补无生命界与生命界的鸿沟，而且与二十世纪科学研究的重点"从存在到演化"相吻合。基本粒子物理学与

① Trans.Faraday.Soc.19, 484, 1923.

天体物理学正在探索宇宙的起源及尔后一直演化到核的过程，量子力学说明电子与核如何形成原子，量子化学又阐明原子形成更高层次分子的机理，现在对生命起源的研究则要揭示自然是如何由无生命的化合物演化而形成最原始的生命的过程。这样由一门学科到另一门学科的过渡，就不仅解释了目前自然界的状况，而且阐明了自然界演化至今的全过程。这是一幅在时间和空间上都应是完整的图画，而目前尚有空白之处。对生命起源的研究将锻造科学链条上由化学到生物学的一环，从而为使整个科学连成统一的整体而作出贡献。

以上我们分析了化学在现代科学体系中的地位和作用的主要方面，此外当前化学还在其它方面发挥作用。例如在对星际弥漫物质的研究中逐步形成新的学科——宇宙化学。这对于研究天体、太阳系的形成，生命的起源，以及宇宙的起源和演化都具有意义。化学在新兴的生态学、环境科学中都起到特殊作用。从微观来看，环境科学要研究离子、原子、分子、细胞和微生物瞬时的相互作用。另一方面又要从宏观、从全球以致更大范围，以及从人类的形成与演变这样的时间尺度来研究环境问题，要将物理学、化学、生物学、天体科学、地质、气象这些学科综合起来 。在电子计算机与人工智能的发展方面，科学家们预言，将来计算机的硬件将不是硅片的集成电路，而是复杂的有机物例如DNA或蛋白质，对此，化学也将起到独特的作用。此外，通过仿生化学的途径，化学将对材料、能源、信息、食物、肥料等各方面都作出贡献。放射性化学还在考古、医学等方面发挥作用。在化学领域应用越来越高深数学的同时，目前化学还通过奇特的途径与数学发生联系。化学家不仅合成越来越复杂的化合物，而且也合成具有各种空间形状的化合物，尤其是前不久合成了茂比乌斯带形状（把狭长纸条扭180°再接成圈形）的分子。看来化学家准备以自己的成果介入拓扑学的领域。

当前地质科学的发展也与化学发生越来越密切的联系。例如地球形成后所发生的变化，从前认为在大气圈的历史发展过程中，从缺氧大气到含氧大气是定向的线性演化过程。而研究却表明了"缺氧期"的存在，还有地壳沉积量与化学元素的突然变化等，这些都显示地球的演化不只是线性的，而更多的可能是一种非线性的变革 。近年来根据地壳变动的研究认为在地球内部存在对流运动，如同受内热驱动的发动机。而"要充分理解受内热驱动的发动机的动力学，就必须把30年里所了解到的有关地球深部化学和矿物学的全部知识统统综合在一起" 。目前对地球内部微观结构的研究工作正在深入，研究不同层次的成分与结构，界面上的相互作用，以及同一层的非均质性等。掌握了这些知识与其它有关知识，将推动地质学的飞速发展。目前由于航天事业的发展，人们对太阳系中其它行星有了更多的认识，要研究这些行星的"地质"状况，与地球上的地质状况和原始大气作比较的研究。这将不仅对太阳系、地球的形成与演化，而且对生命起源的研究提供信息。在这些新的领域，化学家大有用武之地。

总之，二十世纪后化学一方面与物理学紧密结合，朝着阐明化学运动的本质的目标前进，另一方面，化学日益渗入生物学领域，为认识生命的奥秘作出贡献。在更紧密地与

---

① 杨维荣等编，《环境化学》，人民教育出版社，1980年，1—6页。
② 参见《自然辩证法通讯》1981年第5期，37页叶连俊的文章。
③ Wetherill，Drack，《八十年代的地质学》，《世界科学》1981年第7期，5页。

物理学、生物学结合起来的同时，化学也渗入天文、地质等学科。在化学所涉及之处，既有关于对自然界现存物质如核、原子、分子、生物大分子、地质、天体等的研究，也有关于对各种起源的研究，如宇宙起源、太阳系起源、地球起源、生命起源等。这样，进入二十世纪后，化学从一个方面进一步推动科学的统一，这种统一不仅是对现有自然的认识，而且在于认识现有自然界的形成与演化。可以预料，随着科学的前进和化学自身的发展，随着社会需要的增长，化学必将在科学体系中发挥越来越大的作用。

吕 乃 基

2. 从物质运动形式考察化学科学

化学运动的特点是什么？它和其它各种运动形式如物理运动、生命运动形式有什么联系和区别呢？这是近年来自然科学界、哲学界比较关心、讨论比较热烈的问题。这既是一个老问题又是一个重要的新问题。国内外自然科学家和哲学家对于这个问题的看法大体上有两种。一些学者认为，化学、生物学同天文学、力学、地学一样，都可以“归结到数学和物理”。以化学来说，他们认为，随着量子力学规律对化学问题的阐明，随着量子化学的产生和发展，化学科学由定性描述逐渐往定量描述过渡。于是，有些科学家认为，化学实际上是应用物理的一门学问。这种观点，人们有时称之为“还原论”或“大物理论”。另一些科学家则持有不同意见。他们认为化学与物理虽然有密切联系，但化学仍然有其特点，它是一门独立的自然科学分支。他们撰写了许多文章，从化学科学的地位和作用，化学与人们衣食住行的密切关系，以及化学各部门众多的人数，浩繁的文献资料等方面，论证了化学学科的独立性和重要性。然而，这只是论述了问题的一个方面。因为“还原论”者从不否定化学的地位和作用。问题还在于，应当从研究化学运动形式的自身规律，以及由化学运动形式的固有次序和排列的角度出发，论证化学运动形式与物理运动形式的区别和联系，从而就论证了研究这两种运动形式的化学和物理学的区别和联系。讨论这个问题也必然涉及到基础科学之间的关系问题。正确认识和处理各个基础科学的分支之间的关系具有现实意义，这对各学科自身的发展，以及对我们正确制定四化建设中的科学政策、教育计划，对于人材培养和智力投资都具有重大意义。

物质运动形式是科学分类的基本依据

不管人们对基础科学如何分类，各门科学所研究的各类运动形式总是有不同特征的。因为“每一门科学都是分析某一个别的运动形式或一系列互相关联和互相转化的运动形式的，因此，科学分类就是这些运动形式本身依据其内部固有的次序的分类和排列，而它的重要性也正是在这里。”[①] 恩格斯这一段论述正是我们进行科学分类的根本依据和原则，而且是唯一正确的原则。当然，依据物质运动形式的固有次序分类的原则虽然不变，但人们对物质运动“固有次序”的认识是可以改变的。随着人们揭示物质运动形式的手段和方法的改进，人们对各类运动形式的“固有次序”的认识将越来越深

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，227页。

人，将越来越精确细致地排列它们的“固有次序”，以更正确地反映物质运动的客观实际。一百多年前，恩格斯曾按物质运动客体的大小尺度这个极简单的“次序”，进行了科学分类。恩格斯说，从研究天体（如地球）上的较小物体的运动，即刚体运动（产生了宏观物理学），再从研究刚体运动转到研究分子的运动（产生了聚集态物理），又从研究分子运动转到研究原子运动（产生了化学），从研究原子运动转到研究称之为以蛋白质为存在形式的生命运动（产生了生物学）……等等。这是与当时人们对物质运动形式的认识水平相一致的。随着人们对物质运动固有次序的揭示不断更新和深入，科学分类也必然不断更新和深入。这就是学科的发展，边缘学科的不断确立。科学发展到今天，这种学科与物质空间尺度严格对应的关系已经不存在了。同一类运动形式的特征，可以在不同空间尺度内表现出来。也就是说，今天人们所揭示出来的物质运动形式的固有次序，绝不只是按空间尺度进行简单划分，而是有更复杂的次序和特征，因而必须按着新的认识进行新的科学分类。所以，由此而产生的新的边缘学科所研究的对象和客体、概念和范畴，也就不能仅以空间尺度进行区分。

化学运动和物理运动的区别和联系

“对于物质的每一种运动形式，必须注意它和其他各种运动形式的共同点。但是，尤其重要的，成为我们认识事物的基础的东西，则是必须注意它的特殊点，就是说，注意它和其他运动形式的质的区别。”①

研究物理运动形式的科学称之为物理学。研究化学运动形式的科学称之为化学。化学和物理学有什么区别和联系，十分准确地回答是很困难的，正因为如此，在认识两学科的关系上就容易产生分歧。要弄清或者说基本弄清二者的区别和联系，就必须研究化学运动形式和物理运动形式的共性和联系、特性及区别。

先追溯一下学科历史。二十世纪以前，化学不同于物理学。化学被认为是研究物质转化的唯一科学，而那时物理学所研究的只是物质化学组成不变的状态性质。这就有可能容易而准确地把化学过程和物理过程区别开来，从而把化学确定为物质转化的科学，或者确定为物质的组成和结构由于量变而引起质变的科学。到了二十世纪情况发生了变化。随着科学技术的进步，实验手段和方法的改进，人们陆续发现了物质更深刻的转化，如放射性转化的发现导致核转化的实现，继而又发现了基本粒子的转化等等。这些变化已经涉及到化学元素本身的变化，它不是由化学而是由物理学研究的。如果还把核转化看作化学转化，以保持原来的显然已经过时的化学定义，是站不住脚的。结果，不得不放弃化学是关于物质转化的科学定义。

1871年，门捷列夫曾经提出了一个与他所发现的现代化学基本定律——化学元素周期律相联系的化学定义。他说“……可以把现代化学称为关于元素的学说”②。门捷列夫的这个化学定义，对现代化学仍然保持着它的意义。他认为，在化学变化内元素是不变的，原子只在电子壳层的外部易变的部分发生某些变化，原子核和电子层依然不变。他的这种认识，至今仍然是被大多数化学家所公认的化学运动形式的基本特征。

---

① 毛泽东：《矛盾论》。

② 转引自*Большая Советская Энциклопедия* 46 том 169。

然而，随着现代自然科学的发展，核和基本粒子转化现象大量发现，使得物理运动形式的内容和范畴在扩张。现代化学和物理学的界限越来越不清楚。十九世纪原子是化学研究的对象，二十世纪原子也是物理学（原子物理）的研究对象。十九世纪分子运动主要是分子物理研究的对象，而二十世纪的现代化学主要研究的是分子的变化和性质。但是化学和物理学研究同一层次客体的角度是不同的。即在原子、分子这两个层次内，化学运动形式与物理运动形式基本特征是有区别的。以原子（元素）这个层次来说，原子对物理学来说是"终点"，而对化学来说则是个"起点"。这里的"终点"的含义就是，物理学研究原子是把它看作是（在相应的认识水平上）物质结构复杂化的结果；化学则恰恰相反，它认为原子是一个"起始"粒子。在化学中原子被看作是"基本一"，从这个"单位"开始合成一切复杂的原子构成物——分子。分子物理学研究分子是把它视为"基本"构成物——聚集态结构的"结果"；而在化学中分子是视为比原子复杂得多的构成物。

从上述意义上说，物理运动和化学运动是不难区分的。概括起来就是，化学运动形式主要是化学变化或者说化学反应。它涉及到分子和原子两个层次，但是化学变化中发生质变的主要是分子。在一定条件下，分子中的原子之间相互作用（化学键）的结果，使原子发生重排，表现为分子的化合或分解。所说的分子发生质变，是指分子组成和结构的改变。这种质变是由于分子中原子外层电子运动状态改变而引起的。

物理学研究的运动形式虽然广泛地分布于各个物质层次，但它不研究分子组成、结构及其性质的变化规律。物理学研究天体、地面上的物体、分子、原子、核、基本粒子和各种场的运动状态和结构（分子结构除外）；研究万有引力、电磁、强和弱相互作用；研究由于这四种基本相互作用所引起的声、光、电、磁、热等现象，及其相互关联相互转化的规律。

虽然说，从研究每一门科学领域中的自然现象和物质运动形式的特征出发，区分物理和化学运动并不困难，但是这种领域本身并不是自然界现成的最终产物，它表现为从简单到复杂的自然历史过程。而且各种运动形式本身也不是"孤立"存在的，它们也是相互依存的，在一定条件下可以相互转化的。尽管两门学科研究问题的角度不同，但是它们之间是没有严格界限的，区分是相对的。二十世纪以来，物理学和化学两门科学的相互渗透的事实说明了这一点。

我们可以看到，从研究原子核和电子及其由它们所组成的原子的原子物理学，到研究原子（元素）和由原子组成的分子（化合物）的化学，存在着一个过渡；从研究分子的质变的化学，到研究分子和由分子组成的聚集态的分子物理学又是一个过渡。我们说的是"过渡"，既然是过渡就是一个"区"，而不是分界线。"过渡"就意味着运动形式的渗透和关联。这就是说，以分子结构和组成发生变化为前提的化学运动，从两个方向上向物理运动过渡。一方面是从研究分子内部的原子运动引起分子的变化，进入到研究作为完整的分子本身的运动而进入物理运动领域。另一方向是从研究完整的原子运动（在原子运动中，虽然有外层电子的转移和得失，但着眼于原子整体运动而不追究外层电子的运动规律和状态），进入研究原子内部的电子或核的运动规律，又再次进入物理运动领域。在这两个过渡区内，研究物理运动和化学运动的重叠，又会产生新的边缘学科。例如物质的相态之间的相变过程，虽然本质上是分子整体运动，应当归属分子物理学范

畴，但是如果把一个相态的分子变成另一相态的分子的过程，在某种意义上也看成是分子性质的“质变”的话，那么它也是一种化学运动。在传统上，一直是由化学家来研究相变过程的。它正是边缘科学——物理化学的一部分内容。所以，相变运动形式也可以叫物理化学运动。再如，在原子这个层次内，单一原子核的放射性反应；由质子、α粒子等高速运动的粒子与一个原子的相互作用，产生新的核和另一个粒子的核反应过程等，从原子结构发生变化的特点看，这是属于原子物理的范畴。但是，核反应中往往涉及非金属和金属单质元素或惰性气体原子，它们往往单独稳定存在，从这个意义上核反应也是一种“分子”质变的化学反应。事实上，绝大多数化学家早已把放射化学、同位素化学列为无机化学的一部分。也可以说，核反应过程是一种化学物理运动，把研究这个过渡区域的运动规律的科学称为化学物理学。

以上说明，由于物理学从两个方向上向化学渗透，使我们不能简单地把化学运动仅仅看成是一种原子的运动，不能把化学的定义绝对化。这就是说，化学运动形式的内容和范畴也发生或正在发生着新的变化。

我们强调，化学主要是研究分子的质变。这是为了把化学运动的个性和范畴与物理运动相区别。但是，这里的“分子质变”含义是相对的，不可能是唯一严格的含义。近些年来，关于化学运动的范畴和概念，国内外都有人提出了一种新的观点。他们认为，既然核反应可以认为是“化学反应”，那么基本粒子的产生和湮灭过程也是属于化学运动。著名量子化学家鲍林在他的新著《化学》一书中写到：“…探讨这些粒子的性质和反应的科学正在迅速地发展着，这个领域的研究工作主要是由物理学家完成的。然而，粒子的产生、转化为其它粒子、以及湮灭所经历的反应，一般说来，都与化学反应相似，因此，我们有理由将关于粒子的反应和性质的研究，归结为粒子化学的范畴。”① 在这本书中鲍林还以“基本粒子化学及核化学”为标题用一章的篇幅进行了阐述。把基本粒子的湮灭和生成也看作是化学运动，显然是与前面讲的物理运动和化学运动基本定义相矛盾的，当前许多物理学家和化学家并不一定能够接受这个观点。笔者认为，基本粒子的质变——湮灭和生成过程究竟属于哪一种运动形式，是值得物理学家和化学家以及自然辩证法工作者认真研究的问题。讨论这种运动形式的概念、范畴是一回事，而这个层次的问题由物理学家还是由化学家来研究是另一回事，不能混在一起。同时也不能由于物理运动和化学运动已经有现成的定义，就不敢去触及这个问题。笔者是同意基本粒子质变是属化学运动的观点的。它将作为两种运动形式相互渗透和相互关联在更小的物质层次内的一个体现。如果这一命题不成立，那么几十年来流行的核化学、放射化学、同位素化学的概念和范畴也不成立。

我们分析了化学运动和物理运动的区别和联系，就清楚了为什么不能把化学归结于物理，它们是两个独立的，然而是有密切联系的学科。

近年来，由于量子力学方法研究分子性质取得了很大的成就，一部分学者认为物理的理论也可以解决分子发生质变的化学问题了，于是就惊呼，化学实际上是一门应用物理。这完全是一种观念错误。他们没有注意到，确定一门科学对象和范畴的根本依据，是物质运动形式的固有特征，而不是取决于研究物质运动的外部方法。

---

① L.鲍林、P.鲍林：《化学》中译本下册，戴乾圜等译，科学出版社，1982年，852页。

物质运动形式的层次决定基础学科的层次

我们必须把物质运动形式的概念和范畴问题，同研究运动形式的方法和手段问题区别开来。把化学、生物学等说成是应用物理学，正是混淆了物质运动形式的内部特征和研究物质运动的外部方法。方法的还原不等于运动形式的还原，更不等于学科的还原。

为了说明以上问题，我们必须先谈一谈基础学科的层次。基础学科之间的层次是由物质运动形式本身固有的层次决定的。物质运动的形式是由低级到高级，由简单到复杂。恩格斯指出：“研究运动的性质，当然应当从这种运动的最低级、最简单的形式开始，先理解了这些最低级的最简单的形式，然后才能对更高级的和更复杂的形式有所阐明。”①所以学科的确立，也应当是先从研究最简单、最基本的运动形式开始。由于研究数和数的变化产生了数学，由于研究机械运动产生了力学，进而是研究物理运动的物理学，研究化学运动的化学，研究更复杂的生命运动形式的生物学等……。一切物质都在运动，要运动就有数量的关系和变化，物质要运动就要有原因，就存在作用和反作用，所以一切运动形式，物理的、化学的、生物的等都普遍存在着数的运动和力学运动，这是两种最基本的最简单的运动形式，数学和力学是最基本的两个基础学科。其次是物理学、化学、生物学……。

一种运动形式转到另一种运动形式是一种飞跃。一门学科与另一门学科之间不是“归结”和“还原”的关系。恩格斯指出：“…这些科学中的一门向另一门的过渡，从而既表示出两者的联系和连续性，也表示出它们的差异和非连续性。”②这里的联系和连续性的含义应当理解为：第一，有的过程同时伴有两类或更多的运动形式，例如一个化学过程中也伴有物理运动的量的连续性变化，当物理运动的强度达到一定程度就会引起化学运动。第二，同一类运动形式在各物质层次中覆盖，即同一种运动形式可普遍存在于各物质层次内。在物理的、化学的、生命的运动形式内部还有更细致的更复杂的层次，正是人们对各类运动形式之间和内部错综复杂关系的不断揭示，才使许多边缘学科和二级学科不断确立。

基础学科的层次，又可以从描述各种运动形式的量和量纲的层次中反映出来。根据物质运动形式固有层次和特征，经过国际科学界的讨论确定以下七个基本量，并规定了它们各自的量纲：

量	符号
长度	l
质量	m
时间	t
电流	I
热力学温度	T
物质的量	n
发光强度	I_v

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，53页。

② 同上，230页。

从整个自然科学体系讲，用这七个独立量就可以导出所有其它量。如果把这七个量按一定层次分组，可以定义各主要基础学科，并能从本质上反映出它们所研究的物质运动形式的主要特征。下表可以简单表达基本量与基础科学之间的关系。

科学分支	量
数学→几何学	l
力学→运动学	l,t
力学→动力学	l,t,m
物理学→电磁学	l,t,m,I
物理学→热力学	l,t,m,I,T
化学→物理化学	l,t,m,I,T,n

从物质运动形式的观点讲，这里的基本量就是物质运动的基本量。从上表的关系可以看出，基本量的独立（量纲）性反映了学科和运动形式的独立性和区别；它们的排列分组表征了运动形式和学科的连续性和相对性，也反映了学科之间的交叉和渗透。从独立性上理解，如果只有长度l这个量就只能研究几何学，也就是只能反映空间数量之间运动形式，属于数学学科。如果有长度l和时间t这两个基本量，就可以研究运动学，如果再有一个质量m就可以研究动力学，而运动学和动力学均属力学学科。如果有了研究力学的三个基本量，再有一个电流I和热力学温度T，就可以研究电磁学和热力学，它们都属于物理学科。如果除了上述五个量以外，还有一个量，即物质的量n，那么就可以研究现代科学中的物理化学问题了。

基础学科的层次决定理论方法功能层次

运动形式的相互影响、相互关联又相互渗透，决定着学科之间的相互影响、相互关联又相互渗透，这就必然使得在学科研究方法上的相互渗透。人们去研究复杂的分子质变过程中，在研究生命运动中的同化、异化、变异，以及高级生命运动所特有的语言、思维、感情等复杂过程中，都在使用现代科学仪器。而这些仪器都是人们根据简单运动形式，即数量的关系及其变化，位置的移动，以及光、电、磁、热等现象制造出来的。然后再去描述复杂一些的运动形式。基本量和单位选定中的层次，也体现了在学科之间客观存在着方法功能层次，因为每一种相对高级和复杂的运动形式，都包含有相对低级和简单的运动形式。所以，研究简单物质运动形式的理论，就构成了研究相对复杂的运动形式的一种手段。这就是理论方法功能的层次。而其方式是通过“还原”的方法实现的。所谓“还原”，就是力求把高级、复杂的运动形式分解成低级、简单的运动形式。例如，可以把化学运动乃至生物运动形式分解成即“还原”为物理运动或力学运动来处理，从而能够用数学、力学和物理学的理论公式加以定量描述。从方法意义上讲，这的确是一种“还原”和“归结”。但是这种“还原”只是方法，而不是学科本身的还原，更不是说把化学运动形式“还原”为物理运动了。

应用经典力学、量子力学的方法研究分子反应性能，从而产生了化学统计力学和量子化学。但这种方法有局限性。因为一个比力学运动复杂得多的化学运动形式虽然包含

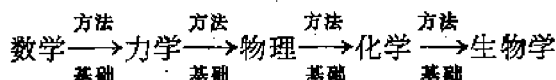
力学运动和物理运动，但不只含力学运动。恩格斯说："更进一步把化学也叫做力学的一种，这在我看来是不能容许的。"①认识和研究物理学、化学、生命科学等运动形式中的力学运动，并通过数学的方法进行定量的描述，只是研究这些运动形式的第一任务，但不是全部任务。"这些机械运动并没有把所有的运动包括无遗。"②因为不能用单纯的位置移动说明一种复杂运动过程，不能用量的差异说明一切质的差异，从而忽视量和质的相互转化。如果是这样，一切粒子，原子核、原子、分子等个体的差异就不存在了，所有的物质都由同一的最小的粒子组成，而物质的一切质的差异都是由量的差异，即由这些同一的最小粒子结合成物质的时候的数目不同而引起的。这显然是错误的。物理运动终究不能完全替代化学运动。

譬如，不能把物理运动中的光、热、电、磁现象用简单的位置运动来解释，尽管这些物理现象中包含有力学运动。又如，仅从物理运动的角度来考察一个H原子，无非是两个带电粒子即一个质子和一个电子所组成的系统，而H_2分子无非是由四个带电粒子即两个质子两个电子构成的系统③。如果基于量的考察，那么H原子和H_2分子的差别无非是说，粒子增加一倍，质量增加一倍，电量增加一倍。这样的解释和说明显然不符合实验事实。实验事实告诉我们，H_2分子的行为和性质，并不等于H原子行为和性质的2倍！一个分子所表现出来的化学反应特性，并不等于组成该分子的那些单个原子的性质的简单加和，一个由多个不同的分子参加的化学反应过程，即伴随有旧分子的破坏和新分子生成的复杂过程所表现出的复杂行为和复杂现象，也决不等于组成该反应系统的单个原子和分子的性质之和。即

一种复杂运动形式≑若干低级简单运动形式之和

化学运动形式≑若干物理运动形式之和，这就说明，把化学运动"归结"和"还原"为物理运动的提法是不能成立的。至于对于更复杂的生命运动，把它还原为物理运动就更荒唐了。

但是，我们的确不能轻视理论的方法功能，应当十分重视科学研究中的方法"还原"。基础学科的层次决定了方法功能的层次。每一门学科的理论除了它对本学科的技术有指导作用外，还可以构成它的次一级，即更高级学科的研究方法和手段。即



把化学运动和生命运动形式"还原"为物理运动形式，把化学科学、生物科学"还原"为物理科学的观点是错误的。但是应用数学和物理的方法去研究化学和生物学问题的行动却是正确的，值得提倡的。轻视和低估理论方法的作用是有害的。数学物理方法在化学和生物学研究上的应用逐步广泛深入，对于学科的发展，对于实现它们从经验学科往理论学科的过渡，实现某些突破，理论方法无疑是起着重要作用的。当然强调数理方法的作用，并不是说化学和生物学本学科的实验研究方法变得可有可无了，二者是相辅相成的。只有二者很好地结合起来，才能比较完整地描述这种复杂运动形式。

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，230页。

② 同上。

③ 彭正衡、聂保玉：《自然辩证法讲义》专题资料之九，人民教育出版社，1981年，124—125页。

总之，不能由于物理方法在化学研究中的应用，就得出化学归结物理的结论。按着这个逻辑，由于方法层次，物理也应归于力学，力学应归于数学，那么自然科学岂不就只剩下了一门数学！

王　正　刚

3. 近代物理学革命与化学的发展

十九世纪、二十世纪之交的物理学革命，象一场风暴影响了自然科学和技术科学的各个领域，并因此而生长出一批富于活力的边缘学科，促成一系列新技术和新的实验手段的出现，揭开了现代自然科学的序幕，化学也受到了这场革命的深刻影响。

十九世纪末化学发展所面临的形势

十九世纪，在文化史上常被称为“科学的世纪”，数学、物理学、生物学、天文学、地质学，以及许多技术学科都有长足的发展。

在这个世纪，化学也取得了比前几个世纪更加辉煌的成就。道尔顿提出的原子论，使过去关于物质结构的臆测和思辨成为重要的科学理论，它较好地说明了当时已发现的化学定律之间的内在联系，成为说明化学现象的统一理论。贝采里乌斯和其他化学家的共同努力，使原子量的测定取得了很大成绩。阿佛加德罗提出的分子论补充和发展了道尔顿的原子论，使原子论建立在更加坚实的科学基础上，奠定了物质结构理论的基础。元素符号、分子式、化学方程式的统一又使化学家有了共同的语言，为学术交流创造了更加便利的条件。门捷列夫和迈耶尔发现了化学元素周期律，把一些表面上看来似乎互不关联的元素统一起来，形成一个有规律可循的体系，逐渐成为无机化学和分析化学发展的重要基础。原子分子论的确立同时促成了经典有机结构理论的形成。有机物的性质与有机物分子结构的互为依存关系的揭示，不仅便于进行庞大复杂的有机物的分类工作，也为有机分析、有机合成开辟了广阔的道路。有机合成的研究成果又直接促成了有机合成工业的建立和蓬勃发展，使化学研究更好地适应了化工生产和整个社会生产的需求。从此，化学知识更深地介入人类的生活。

在这些成就面前，化学对生产的指导作用日益明显，化学给生产、生活带来的变化更为显著。化学作为人类共同创造的财富，进一步打破了疆界，国际上的学术活动、科学交流日益广泛地展开，科学的思想、科学的精神、科学的方法深入人心。同时，这些成就也使部分化学家感到踌躇满志。

许多化学家对自拉瓦锡时代以来化学所取得的巨大成就感到自豪。他们看到了原子分子论的确立和应用，使化学有了最基本的理论。化学元素周期律揭示了自然界一条重要的客观规律，有机结构理论把庞杂的有机物纳入条理分明的科学体系。这些成果表明化学家主要是依靠经典化学的方法，使无机化学和有机化学的系统化工作接近完成，化学初步形成了自己的独立的理论体系。因此许多化学家热衷于在有机化学研究中采用非定量推理方法，轻视数学定律的应用。十九世纪中叶开始出现的化学与物理学的分野和对立，又使大多数化学家或多或少地存在轻视物理学的倾向，这就造成他们缺乏物理学的素养，使他们不太注意物理学的新发现。就是当化学家的某一实验观测成果，偶尔为物

理学家所采用，并由此进而取得新成果时，化学家对此也是漠不关心。当然，情况并不绝对是这样。在十九世纪的最后三十年，化学发展所取得重要成果的相当部分，却要归功于那些既懂物理又懂化学的科学家，即物理化学家。他们建立起来的化学热力学、化学动力学、电离理论等，使物理化学这门第一个边缘学科得以成长，和成为化学科学中一个重要的组成部分。由于习惯的偏见，物理化学家的许多观点和他们的研究成果，常常遭到化学界的冷遇，甚至于反对。电离理论提出后的遭遇就是一个典型。

十九世纪末，在许多化学家感到满足的同时，面对着化学本身发展所提出来的一系列问题，他们却束手无策。怎样解释诸如周期律的实质，原子价概念的本质，光谱的秘密，分子性质与分子结构互为依存关系的根据，离子概念和电离理论等问题，许多化学家曾作了很大的努力，但是，道尔顿原子论中关于原子不能分、元素不能变的观念在他们头脑中根深蒂固，使他们很难在这些关键的课题上有所突破。例如，门捷列夫在晚年也曾努力解答元素周期律的实质，但他和许多化学家一样，目睹了原子分子论在十九世纪确立的历程。原子论的基本观念已成为不容怀疑的真理，促使他们无法接受元素可以嬗变、原子可分等新的实验事实。门捷列夫在1902年发表的小册子《从化学观点来了解世界的尝试》中，就否认原子的复杂性和电子的存在，并强调元素不能变的观念特别重要，是元素周期律得以成立的前提。直到1906年，即他去世的前一年，还在他的名著《化学原理》的最后一版中，表示了对这些新观点的怀疑。

更有甚者，十九世纪化学发展所依赖的主要理论——原子论再次遇到了攻击。十九世纪末，哲学上的实证论在一部分哲学家、科学家中占据了一定市场。它认为知识只能直接来自经验，不能直接经验到的东西都属于形而上学。这种观点使一些著名的化学家、物理学家再一次对原子论提出怀疑。因为当时原子和分子是否存在还不能由实验来直接检验，物理化学的奠基人之一奥斯特瓦尔德作为一个代表人物，就提出原子论和分子论都是“有害”的假说，必须摒弃。1895年他还提出了“唯能论”，把能量作为世界最终的实在，认为经唯能论改造后的化学理论，可以全部推导出本来只有原子论才能解释的那些定律，因此，原子假说即将成为不必要的了。

面临化学进一步发展所必须回答的问题，以及原子论再次遭到的挑战，说明化学的发展进入了一个紧要的关头。

物理学革命首先波及的是化学

十九世纪末，正当不少物理学家认为物理学理论已接近最后完成，物理学的发展基本上已达到顶峰的时候，古典物理学体系本身却开始出现了不可克服的危机。1887年，美国实验物理学家迈克尔逊和美国化学家莫雷合作进行精度很高的“以太漂移”实验，实验结果看不到一点以太漂移的迹象。1895年，德国物理学家伦琴在探索阴极射线本性的实验中，意外地发现了被他称之为X的射线。X射线的研究又导致1896年法国物理学家贝克勒耳发现了铀盐具有放射性。居里夫人在考察放射性物质中，1898年进而发现了放射性元素钋和镭。继镭之后，另一些放射性物质相继被发现。关于阴极射线的本性，物理学家之间曾争论了四十年，在发现X射线的促进下，1897年英国物理学家J. J. 汤姆生对阴极射线作了定性和定量的研究，终于证实阴极射线是由带负电荷的粒子组成，并测定了这种粒子（即电子）的荷质比。短短几年所取得的这些实验事实，都是古典理论所无法解释

的。在这种情况下，对物理学理论的基础进行根本性的改革是不可避免的。

爱因斯坦于1905年、1915年先后创立了狭义相对论和广义相对论，否定了牛顿的绝对空间和绝对时间的观念，揭示了空间、时间、物质、运动之间的本质上的统一性。相对论既是原子内部微观物理学的基础，也是天体物理学、宇宙学的理论基础。为克服经典理论对黑体辐射解释的困难，1900年德国物理学家普朗克提出了量子论。这一假说于1905年为爱因斯坦发展为光量子论。1913年，丹麦物理学家玻尔用量子论来解释他的老师、英籍新西兰物理学家卢瑟福的有核原子模型后，创立了原子结构理论。这理论在解决原子物理学的问题上取得了很大的成功，解释氢原子光谱的一些实验规律也得心应手。但对于多电子原子，玻尔理论就束手无策了。因为玻尔的理论是以普朗克的量子论为依据，而普朗克的量子论仍以描述宏观物体运动的经典力学为基础，在解决微观客体的运动规律时不适用。严格来说，玻尔理论也不是一个逻辑上一致的理论。这种理论上的混乱直接导致量子论陷入困境。后经法国物理学家德布罗意、德国物理学家海森伯、奥地利物理学家薛定谔等人的突破性工作，于1926年建立了量子力学，概括了微观世界物质运动的规律。

相对论和量子力学的建立就是物理学革命的主要内容，它不仅解决了许多古典物理学所无法解决的问题，还大大扩展了物理学研究的领域，建立了象原子核物理、量子电动力学、量子统计物理学等许多新分支，并取得了原子弹、核反应堆等重大技术成就。当物理学革命的成果被推广到其它学科后，在整个科学技术领域内产生了深远的影响，使人们对物质、能量、空间、时间、运动、因果性等基本概念有了新的认识，为科学技术的发展开辟了新的纪元。

物理学和化学一直是关系密切的两门基础学科。在古代，自然哲学曾囊括了人们对自然界的各种认识和猜测。物理学一词最先被提出，作为自然科学的总称。后来随着自然科学的发展，它的一些分支先后形成独立的学科。但是发展至今，物理学仍是自然科学中较重要的学科。它着重研究物质运动最一般的规律和物质的基本结构。它的知识和方法往往对其它学科和生产技术的发展起着不容忽视的影响。化学则是古代人们在实现物质变化的实践中，以及后来的炼金术一类的实验中逐步发展起来的。它着重研究各种物质的组成、结构和性质，以及它们相互之间的关系。由于研究的对象都是物质，所以在道尔顿之前，许多物理学家都曾研究过化学问题，许多化学家也可以称作物理学家，例如波义耳、牛顿、布拉克、卡文迪许、拉瓦锡、道尔顿等。如前所述，在十九世纪，化学家们运用原子不可分割、元素固定不变的理论使炼金术的踪迹荡然无存。他们把主要的精力用于发现新元素，制取新的化合物和研究它们的性质和反应。对于物理学的进展基本上是漠不关心。同样，这时期的物理学家则忙碌在根据牛顿物理学图式建立起令人满意的体系，对化学研究的成果也是视而不见。他们使用化学物质，不过是想从它们的性质中概括出固体、液体和气体的理想状态，并不关心化学家所研究的具体物质的性质。虽然这种人为的化学与物理的分野、甚至于对立留下了痕迹，但是在历史上是短暂的。就在这期间，个别的物理学家和化学家曾进行了很好的合作，并取得了突出的成绩。例如德国化学家本生和物理学家基尔霍夫合作，在光学、光谱分析中获得了极大的成功。事实上，十九世纪下半叶，在物理与化学的接壤部分成长起来的物理化学，就充分地表明尽管研究的范畴和方法不同，化学和物理这两门基础学科具有密切的联系，化学家和物理

学家的合作是大有作为的。物理和化学这种密切的关系，决定了物理学革命对化学发展的影响最直接、最迅速。

物质结构问题，既是物理学、同样也是化学的基本问题。在古代，关于它的讨论主要集中在部分自然哲学家中进行。到了近代，波义耳提出了科学的元素概念，尔后经拉瓦锡等人的发展，特别是在道尔顿建立了化学原子论后，不仅化学发展进入一个新时代，同时也为物质结构理论的科学探索揭开了序幕。在十九世纪，物质结构理论主要地是依靠化学的发展而有所进展，而化学本身的发展也始终没有离开物质结构理论这条主线。所以对于物质结构的探索工作主要由化学家来承担。大量的化学研究都围绕着阐明原子这一概念及其化学运动中的规律，所以有人认为化学是研究关于原子的科学。到了十九世纪末，化学要进一步发展，原子不能分、元素不能变则成为化学家继续前进的障碍。事实上，当时化学发展所提出来的一系列问题的症结，就在于必须揭开原子结构的秘密。象门捷列夫一类化学家是无力搬开这一障碍的。鉴于认识方法和实验手段，打开原子大门的钥匙很自然地掌握在电学研究已有雄厚基础的物理学家手中。

电子的发现和放射性元素的嬗变理论，打破了长期以来认为原子不生不灭和元素不变的传统观念。对此化学家们不能不感到吃惊。向原子进攻和“分裂原子”成为世纪交替时期最振奋人心的口号。到玻尔为止相继提出来的各种原子结构模型，也使化学家感到莫大的兴趣，他们纷纷前来参与发展原子结构理论有关的工作。而物理学家也变得更加关心化学问题，他们一起运用原子结构理论和其它物理学的新成果，来解决各种现实的化学问题。物理和化学曾相持的对立局面烟消云散，从此开始了新的、更为密切的联系。

物理学革命开辟了化学发展的新时代

在打开原子结构的大门后，化学家们运用物理学革命的成果，逐步解决了十九世纪末遗留下来的一系列难题，开辟了化学发展的新时代。他们所取得的进展可归纳为以下几个方面。

到1907年止，被分离出来的放射性元素已达30种，化学元素周期表显然已无法容纳。对放射性元素及其衰变产物的研究还发现，某些放射性元素（包括那些具有放射性的衰变产物）同周期表中某些元素的化学性质极其相似，甚至用任何化学方法都无法将它们分离，它们应在周期表中占据同一个格子。据此，索迪于1910年明确地提出了同位素概念和理论。同位素的发现又使人们对“化学元素”这一概念有了新的认识。化学元素不再只是代表一种元素，而是代表一类元素。尽管这类元素的放射性和寿命不同，但是化学性质完全相同。随着深入研究同位素，对原子量这个概念也有了新的理解。通常所说的原子量只是自然界某元素的原子量，是某元素的几种同位素依据在自然界占据不同的比例而得到的平均原子量。当英国物理学家查德威克1932年发现中子后，人们进而认识到，稳定同位素是由于具有相同数目的质子和不同数目的中子所形成。质量数是质子数和中子数之和。质子数决定了原子序数，也决定了核外电子数，是决定元素化学性质的主要因素。中子数不同只影响原子量，而不影响化学性质。由此既揭示了同位素的实质，又解答了原子量、原子序数及核外电子数之间的关系。

在研究X射线的实验中，1911年英国物理学家巴克拉发现了每种元素都有自己的特

征X射线。1914年英国物理学家莫斯莱又发现，各种元素特征X射线的波长顺序恰好与该元素在周期表中排列顺序一致，并以此提出了原子序数的概念。实验证明，原子序数在数量上恰好等于核电荷数，这表示决定元素在周期表中排列顺序的是原子内部的因素，即原子核所带的电荷数。原子序数的提出，赋予元素周期律以新的涵义，即元素性质是其原子序数的周期函数。原子序数的测定能更准确地判定元素在周期表中的位置，还可预测尚未发现的元素。根据玻尔的原子结构理论和原子光谱等实验事实，科学家描述了各种原子的电子结构。从这些电子结构图，可以清楚地看到随着原子序数的递增，原子核外电子的排布由里往外遵循一定的规律，它最外层电子数总是由1至8，周期性的重复。在同一族内，最外层电子数基本一样。元素的化学性质完全取决于它核外电子的排布，特别是最外电子壳层的状况。所以元素的化学性质，随着原子序数的递增而呈现周期性的变化。元素原子的电子结构使元素性质是原子序数的周期函数这一点，得到科学的阐明。量子力学建立后，化学家借此发展了原子结构理论，使人们对电子在核外排布和运动有了科学的新认识。由此可见，原子结构理论的建立和发展，十分清晰地阐明了元素周期律的实质，并使元素周期律得到充实和发展。从此元素周期律有了更为可靠的科学基础。

各种原子以什么力量和方式相结合而形成各种化合物，这是化学理论的核心问题之一。过去很长一段时间里，化学家沿用“化学亲合力”来表达这种结合的秘密。但是化学亲合力一直没有明确的定性或定量的含义。十九世纪下半叶，通过对有机化合物的研究，化学家提出了原子价的概念，并以它来代替化学亲合力。然而，原子价的实质问题直到十九世纪末仍未解决。

在电子被发现后的1904年，波兰化学家阿培格根据元素周期律和实验所反映的事实，提出了原子价的八数规则。不久有人补充指出，正价数表示原子给出的电子数，负价数则是一个原子可以接收的电子数。将原子价与电子的概念联系起来，显然使人们对原子价的认识前进了一步。1916年至1919年间，德国物理学家科塞尔与美国化学家路易斯和朗缪尔，在原子结构模型基础上，为解释原子价的实质，相继提出了原子价的电子理论。科塞尔的离子键理论完满地解释了离子型的化合物，路易斯-朗缪尔的共价键理论，对一些非极性分子化合物的解释也令人信服。但是玻尔原子结构理论的缺陷，必然要暴露原子价电子理论的不足，不仅在解释多电子原子的分子，甚至连最简单的氢分子的化学键都得不到满意的结果。

就在量子力学建立后的第二年，即1927年，德国的海特勒和美国的伦敦，采用量子力学的薛定谔方程来研究氢分子而取得成功。他们指出，两个氢原子所以能结合成一个稳定的分子，是由于分子中电子运动的范围主要集中在两个原子中间，形成一个类似于电子桥的化学键，把两个氢原子核拉在一起，组成了稳定的氢分子。他们的成果不仅建立了化学键的崭新概念，还推动了应用量子力学的原理研究多原子分子。运用量子理论来研究电子在分子中运动、分布和参与成键的情况，研究有关分子性质的物理基础，从而建立起量子化学这门学科。

量子化学的发展，先后提出的价键理论、分子轨道理论等，使人们对化学键本质有了步步深入的了解。化学键理论也成为探索新的化学反应、合成新材料的有效指南。在量子化学的发展成果中，1965年美国化学家伍德瓦德和霍夫曼提出了分子轨道对称守恒

原理，标志着现代化学开始从研究分子的静态跨入了研究分子的动态，揭示化学变化规律也进入了新的阶段。

十九世纪，无论是无机化学还是有机化学的发展，都对深入地探索化合物的结构及其与性能的关系提出了更迫切的要求。满足这要求却得借助于物理学革命的成果。X射线的发现不仅为认识原子结构起了引线的作用，同时在科研和医学上都有着重要的使用价值。1911年德国物理学家劳埃，发现X射线通过晶体的立体点阵结构可以产生衍射现象。这一发现及时地提供了一种测定物质结构的新方法。这就是X射线结构分析。基于同样的原理，后来又发现了电子衍射、中子衍射、分子光谱法和多种磁共振等方法。应用这些方法可以直接测定晶体和其中分子的结构。化学作为分子的科学，系统地研究分子及晶体的结构及其与性能的关系是极其重要的。自从1912年英国物理学家布拉格父子，运用X射线衍射法对氯化钠、氯化钾等晶体进行测定后，科学家们又陆续对硫化锌、荧石、方解石等一系列无机盐、硅酸盐晶体的结构，对多种金属和它们的化合物的结构进行测定。从四十年代至五十年代，凡属于代表性的无机物、有机物的晶体结构都进行了测定，积累了相当丰富的资料，成功地解决了金属、金刚石、石墨等大批物质的结构之谜。这对结构化学及材料科学和技术的发展都是极为宝贵的。特别鼓舞人心的是，在研究蛋白质、核酸、胰岛素等晶态生物大分子中取得了可喜的收获，为生物学的发展、生命奥秘的揭示作出了重要的贡献。

物理学革命对化学所产生的深刻影响，还反映在化学科学中最古老的分支——分析化学的变化上。二十世纪以前，分析化学的主要内容可以说是化学分析，即重量法、容量法等分析手段占统治地位。虽然采用物理原理的仪器分析手段，如比色、光谱等业已在十九世纪下半叶出现，但是由于它们的原理并没有很好解决，方法显然不成熟，运用起来就有许多局限。例如光谱分析至多作点一般的定性分析。物理学革命之后，原子结构理论阐明了光谱的秘密，光谱分析迈出了重要的一步，1924年开始了光谱定量分析。光度分析法同样也获得飞快的发展，从光电比色法发展到分光光度计。比色分析在四十年代开始大为风行。电化学分析也是如此，1925年才开始使用的极谱分析运用就很广。物理学、电子学的巨大进展，使分析工作得到崭新的装备，很大程度上改变了分析化学原来的面貌。二十世纪下半叶起，这一变化更为显著。一大批采用物理学、电子学、数学及激光技术、微波技术等新成就而研制成的分析仪器，进一步取代了经典的化学分析。这些分析仪器以快速、高度灵敏为其特征，使分析手段仪器化，分析过程自动化。同时还扩大了分析的内容，过去的化学分析主要解决物质的成分，而现在的分析化学，测定的范围从宏观发展到微观，从总体扩展到微区，从整体深入到表层和薄层，分析内容已远远超越单纯的物质成分，而涉及到物质的内部结构。所以有人说，现在的“分析化学”越来越象“分析物理”，这种说法不是完全没有根据的。

物理学革命推进化学基本理论的发展。化学的原理和定律有了更扎实的科学基础，逻辑上也更统一了。化学知识和化学方法更好地发挥了作用，并迅速地向其它学科渗透，逐渐形成了诸如生物化学、地球化学、海洋化学、天体化学等边缘学科。这些边缘学科的发展，开辟了许多新的研究领域，丰富了化学的内容，也对其它学科的发展产生了深远的影响。新兴的材料科学、环境科学等综合性学科，都以化学作为它的基础之一，进一步显示了物理学革命后的化学，作为一门基础学科具有广泛的应用。现在化学

知识和化学的研究手段，几乎深入到生产、生活的每一角落，与人类生活紧密地联系在一起。所以化学不仅没有被物理学革命所吞没，而是有了更广阔的发展前景。

周 嘉 华

4.化学与生物学

近三十年来，由于化学等学科向生物学的渗透，形成了分子生物学。分子生物学的发展对化学和生物学都有重大影响。这里仅从分子生物学的形成和发展过程，来探讨化学与生物学的关系。

分子生物学是从分子水平上研究生命过程及其物质基础的科学

二十世纪以前，生物学的理论探讨和实验研究基本还停留在宏观水平上，对生物体生长、发育、繁殖、遗传、变异、物质代谢、能量转换、信息传递等过程的微观本质和机理，仍然不清楚。

到二十世纪五十年代，由于自然科学和生产技术都有若干重大突破，伴随化学等有关学科和一些实验技术的发展，生物学进入了一个新时期，开始从分子水平上考察各种生命问题，形成了一门同化学关系非常密切的新的边缘科学——分子生物学。

分子生物学是一门年轻的学科，现在还很难给出一个公认的确切定义。不过，对分子生物学研究的基本内容倒有比较统一的看法。通常，狭义的分子生物学是指分子遗传学而言，广义的分子生物学则包括分子遗传学、细胞膜结构、代谢调节机制、蛋白质和核酸的结构分析和功能测定、生物大分子的人工合成、遗传物质的分子重组等①。实际上，可以把分子生物学看成从分子水平上研究生命过程及其物质基础的科学②。

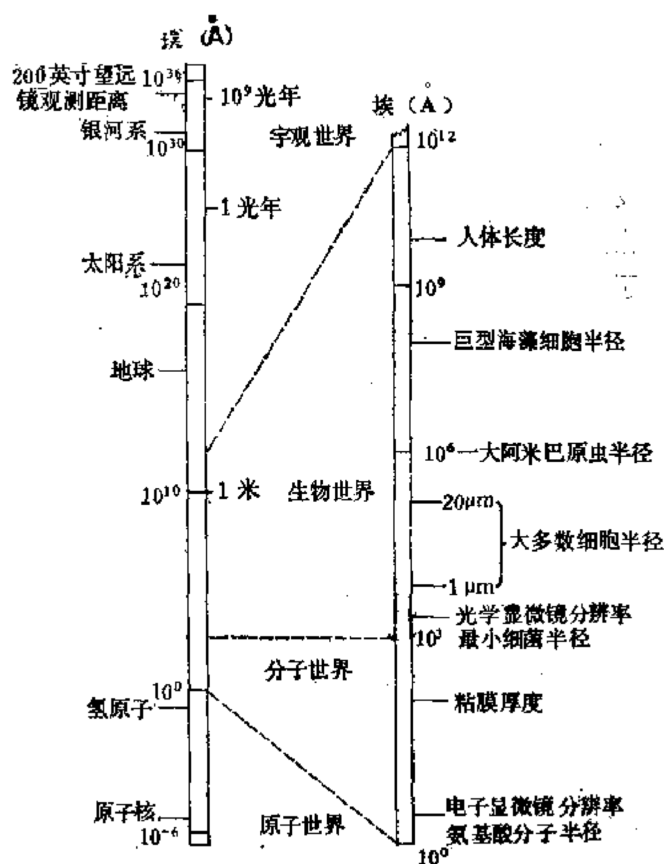


图1.1 宇宙和生物的直观尺度谱

---

① 胡文耕，《分子生物学中的哲学问题》，天津人民出版社，1982年，2页。
② 《化学发展简史》编写组，《化学发展简史》，科学出版社，1980年，313页。

根据美国休斯顿大学化学工程教授拜里和普林斯顿大学化学工程副教授奥利斯，在《生物化学工程》教科书中给出的宇宙和生物的直观尺度谱（图1.1）[①]，如果仅仅从体积大小的角度出发，似乎可以说分子生物学是从10^0—10^3 Å的分子尺度上去研究10^8—10^{12} Å的生物世界。

虽然分子生物学从诞生到现在只有短短三十几年的历史，但是它发展迅速，成果辉煌，影响广泛，堪与细胞的发现和进化论的创立相媲美，是生物学发展史上的一个里程碑，对现代自然科学和哲学都有深刻的影响和巨大的意义。

化学在分子生物学形成和发展过程中起着重要的作用

回顾分子生物学形成和发展的暂短历史，可以明显地发现，化学理论知识和化学实验方法所起的重要作用。

(1)化学实验方法的应用

一门自然科学的形成和发展，在很大程度上取决于实验手段的加强和研究方法的改进。化学分析与化学合成等方法应用于生物学，为在分子水平上研究生命过程及其物质基础提供了有力的手段，对一些重要物质的提纯、分离、制备及结构和性能的测定起了重要作用。

化学分析方法在生物学中的应用早就开始了，尤其值得指出的是，生物化学方法在遗传学研究中的应用，取得了很多成果[②]。本世纪四十年代前后，层析法、电泳法、离子交换法等分析方法，用于分离和测定生物大分子及其水解产物，研究它们在生物体内代谢过程中的作用，收到了比较好的效果。例如，在遗传密码的揭示中，电泳分析技术起了特殊重要的作用。到六十年代初期，电泳分离达到相当高的精度，甚至能在一根纤维素的纤维上，把同一细胞各个不同部分的核酸中的核苷酸彼此分开[③]。

同位素和放射化学方法用于生物学，不仅在遗传育种方面取得重要成果，而且，在追踪生物化学变化过程，认识生命现象的分子机制方面起着重要作用。例如，在绿色植物光合作用的研究中，1948年，美国的卡尔文用碳14阐明植物体内二氧化碳的同化作用过程；1949年，美国人吉奥寇用氧18示踪原子，发现光合作用所放出的氧，来自水而并非来自二氧化碳。

还有其它一些物理化学分析方法，如结晶分析、旋光分析、比色分析、比浊分析、密度梯度超离心分析等，对分子生物学的形成和发展也起了不小的作用。

化学合成方法应用于生物学，在合成生物大分子并认识其结构与功能上起到了积极作用，促进了分子生物学的形成和发展。

胰岛素是已知蛋白质中的最小分子，1955年，胰岛素中的氨基酸立体排列顺序确定后，世界上很多国家都力图进行人工合成，我国化学工作者首先取得成功。用化学方法合成胰岛素，是人类探索生命起源和进化，并用化学方法进行人工合成研究的一项重大成就。如果说尿素的化学合成填平了无机物和有机物之间的鸿沟，那么胰岛素的合成则

---

① Jamse E.Bailey and David F. Ollis, *Biochemical Engineering Fundamentals*, McGraw-Hill Book Company, 4 (1977).

② 〔美〕A.怀特、P.汉德勒、E.L.史密斯，《生物化学原理》上册，科学出版社，1978年，2—6页。

③ 〔英〕J.N.达维生，《核酸的生物化学》（原书第六版），科学出版社，1973年，21页。

突破了一般有机物同生物高分子之间的界限。从此，人工合成生物大分子的新时期开始了。

六十年代以来，化学合成法在核酸的人工合成方面发挥了重要作用，取得了显著成果。1970年，美国麻省理工学院的柯兰纳等合成了酵母丙氨酸t-RNA的基因(77对核苷酸)；到1976年，人工合成的大肠杆菌酪氨酸t-RNA的基因达199对核苷酸；我国在人工合成核酸的研究中也取得巨大进展。这些成果表明，人们在分子水平上揭示控制生命过程的内在原因，和认识生命现象的本质是很有希望的。

化学方法在合成对生物体有重要作用的其它化合物方面，也得到广泛应用。1965年，美国化学家伍德沃德用化学方法合成了当时唯一尚未被合成出来的已知维生素B_{12}，被誉为化学合成史上的佳话[①]。维生素B_{12}分子含六种化学元素共181个原子，分子式为$C_{63}H_{88}N_{14}O_{14}PCo$，立体结构相当复杂。在合成过程中，每一步化学反应都必须朝着指定的立体构型方向进行，否则得到的产物就不会与天然维生素B_{12}相同。在分子轨道对称性守恒原理等化学理论的指导下，维生素B_{12}的化学合成顺利成功。此外，象生物体贮存能量的高能化合物三磷酸腺苷、植物光合作用中起催化作用的绿色色素叶绿素和某些激素等，在合成中也都运用了化学方法。

分子生物学的实验研究，如分析、合成、变化机制的确定等，还常常要使用大量的普通和特殊的化学试剂。分子生物学实验中所使用的化学试剂，不仅用量大而且种类多，仅《分子生物学方法》[②]一书中提到的就有上百种。可以毫不夸张地说，在许多场合下，没有适当的化学试剂，分子生物学的实验研究几乎不可能进行。

（2）化学理论知识的渗透和应用

化学概念、原理和规律渗透并应用到生物学中，促进了分子生物学的形成和发展。

本世纪四十年代以后，随着对蛋白质和核酸等生物大分子研究的进展，一些化学概念渗透和应用到生物学中，与生物学研究的具体对象相结合，有了新的内涵和外延，成为分子生物学基本概念的组成部分。例如，酸碱度、等电点、肽链、肽键、磷酸二酯键、氢键、疏水键、盐键、亲水基、疏水基、残基、碱基等，还有与电化学中标准电极电位相应的生物化学标准还原电位[③]，以及其它一些与化学相近的概念。

同时，某些化学原理渗透和应用到生物学领域，与生物学知识相结合，演变和发展成分子生物学的有关理论。因为生命过程的微观变化，主要是分子水平上的化学变化，一般地说，宏观行为都要通过和伴随微观化学反应而进行。所以化学原理和规律与分子生物学研究的问题关系相当密切，必然要渗透和应用到分子生物学之中。例如，化学上分子结构理论的构型和构象，渗透和应用到生物学中，形成分子生物学中生物大分子从低级到高级不同结构层次的构型和构象理论；化学上催化剂的催化作用机制，渗透和应用到生物学中，发展成分子生物学中描述酶促反应的酶催化模型。还有很多其它例子，这里不再赘述。

---

① 胡昌明："现代合成化学的作用"，载《现代科学技术简介》，科学出版社，1978年，426页。

② 〔联邦德国〕P.康德拉、W.阿纳尔：《分子生物学方法》，科学出版社，1977年。

③ J.William Moncrif and William H.Jones, *Elements of Physical Chemistry*, Addison—Wesley Publishing Company, 163 (1977).

(3)化学家的重要作用

化学家对分子生物学形成和发展的贡献，儿乎不亚于生物学家，有时甚至超过生物学家。在DNA分子结构的确定和功能的研究中，化学家工作的重要性显得更为突出一些。

1951年，美国化学家鲍林提出蛋白质分子的螺旋结构模型，受他的思想和工作启发及影响，美国生物学家沃森和英国生物学家克里克，根据X射线衍射数据，提出DNA分子一级结构的双螺旋模型（图1.2）。而他们也常常被称为化学家。

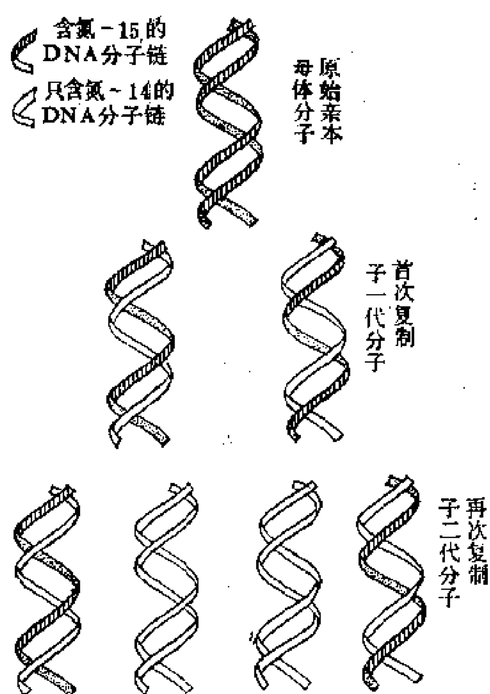


图1.2 双螺旋结构模型

DNA分子的双螺旋结构模型，被化学家和生物学家的实验进一步所证实。如左图所示，让细菌在含有氮15的介质中生长，之后突然换成只含氮14的介质。按华森和克里克的模型，DNA分子第一次复制结束时，氮15示踪标记物质将被耗尽，并生成含氮14链和氮15链的分子；第二次复制则形成含氮14链和氮15链的分子，以及含氮14链和氮14链的分子。用密度梯度离心法观测实验结果，与华森和克里克的预言相符合①。美国化学家莫尔和斯坦确定了DNA分子内组成单元的精确结合顺序（获1972年诺贝尔化学奖），美国化学家伯格创立了一系列分离和连接DNA的基因工程技术，另一位美国化学家吉尔伯特则提出简便测定DNA分子中核苷酸顺序的化学降解法，英国化学家桑格以直读法测定了噬菌体ΦX-174完整DNA分子的全部核苷酸排列顺序。

此外，桑格于1955年首先测定了胰岛素分子中氨基酸的顺序；在英国工作的澳大利亚化学家康福思建立了酶催化反应的立体模型；英国化学家米奇尔通过营养物向细胞运动中的精确化学反应实验研究，找到生物体把食物变为能量的机理，创立了“生物能学”的新概念。如此等等，不胜枚举。

化学家，特别是生物化学家，在分子生物学形成和发展过程中的重要作用，正象著名英国生物化学家霍普金斯曾经指出的那样，“在描述生命时，生物化学家的语言可能不是结论性的议论，但是没有生物化学家们的帮助，结论性的议论就决不会说出来”②。实际上，分子生物学形成和发展过程每前进一步，都凝集着化学家的创造性劳动和巨大的贡献。

（4）分子生物学的发展对生物学的影响

---

① Walter J. Moore, *Physical Chemistry*, 5th ed., Longman Group Limited, 942—944 (1972).

② 胡文耕，《分子生物学中的哲学问题》，天津人民出版社，1982年，81页。

分子生物学的迅速发展，取得了一系列重大突破，核酸分子结构的确定，遗传控制机理的揭示，生物大分子的人工合成，酶催化模型的提出，膜结构和功能的认识，蛋白质合成的调节方式的阐明，基因重组的实现，等等。这些成果大大改变了生物学的面貌，使人们对进化论和遗传学等生物学规律的认识，从宏观现象深入到微观本质，开始从分子水平上探索生命之谜，进一步认识生物体生长、发育、繁殖、遗传、变异、物质代谢、能量转换、信息传递等过程的物质基础和变化的分子机制。这些变化已经扩大和影响到生物学的各个方面和分支学科，如分子遗传学、分子免疫学、分子药理学、分子疾病学、分子放射生物学、分子胚胎学、分子酶学、分子病毒学和分子分类学等。使这些分支学科的理论和方法得到进一步发展。

本世纪六十年代形成的植物化学分类学，探讨各分类群所含化学成分的特性和合成途径及其在植物系统中的分布规律，从植物中的化合物角度出发，研究植物的系统发育[1]，实质是对植物进行分子分类。

在进化论深入到分子水平研究时，从某些分子的组成和结构特点揭示生物进化的规律，可以看成是生物的分子进化论。例如，细胞色素C对所有需氧生物（从酵母到人）都是最基本的一种蛋白质，它做为电子转换系统的复合体，具有帮助氧化食物和激活细胞呼吸等重要生理功能。对不同生物的细胞色素C分子间差异的分析，从一个侧面提供了认识最后10亿年蛋白质和生物种类进化的途径，在一定程度上反映出生命进化的分子机制。通常，细胞色素C的进化是非常缓慢而微小的，两个不同族系的细胞色素C分子中氨基酸顺序产生百分之一的变化需要两千万年[2]。图1.3中，各物种间连线的距离，与它们细胞色素C分子中氨基酸差别处的数目成正比。例如，马同人细胞色素C分子的104个氨基酸中有12处不同；人与狗有10处不同；酵母与人和马有45处不同[3]。差异这样大的两个分子，当然不能执行完全一样的生理功能。近年来，有关这方面的发展还导致进化的中性学说，从而在把达

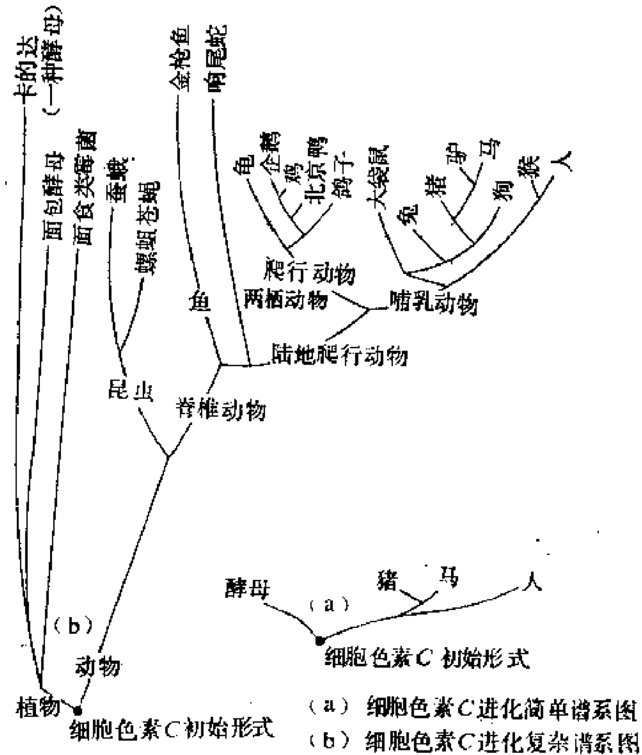


图1.3 细胞色素C进化谱系图

① 参见《生物科学参考资料》第四集所载何关福的文章，科学出版社，1974年，52页。
② 《生物科学参考资料》第三集所载Richard E. Dickerson文章的译文，科学出版社，1973年，15页。
③ Julan Davies & Barbara Shaffer Littewood, *Elementary Biochemistry*, Prenice-Hall Inc., 142—145 (1979).

尔文进化论深入到分子水平的同时，进一步完善了生物进化的理论。

由于分子生物学发展所产生的巨大影响，使传统生物学的理论和实验都发生了重要变革。从研究的对象、内容和方法来看，把生物学称为生命科学似乎更为确切。

分子生物学的发展对化学科学的重大影响

分子生物学的迅速发展和它所取得的巨大成就，反过来也对化学科学产生重大影响，开阔了化学家的眼界，扩大了化学的研究领域，促进了化学理论和方法的发展，使化学科学的内容更加丰富而广泛了。

（1）给化学提出了新课题

分子生物学的发展，提出了许多与化学关系密切的新课题。例如，关于生命起源问题，地球上由无机物自然发展、演化成生命体的真实过程和分子机制；关于行为科学问题，人类的感情、语言和思维等高级行为的宏观表现，与体内微观物质的化学变化之间的关系；生物体生命过程的自我调节、自动控制和生命现象的化学本质；利用、改良乃至创造新生命的问题；其它星球是否发生生命的问题，等等。化学家正在为解决这些问题而努力探索。例如，美国化学家卡尔文等人，对生命起源的化学进化做了20年的实验研究，于1976年提出分子进化、多聚物进化、结构进化、催化作用进化和信息传递进化等具体过程的见解，认为“生命现象是宇宙的原子组成按已知的各种化学原则演变的必然结果”①。

在当前，主要是研究与生命关系紧密的物质。核酸和蛋白质等生物大分子的结构分析、功能测定与人工合成；各种维生素和激素的分析、合成、制备和应用；无机物和小分子，如很短的核苷酸片断、某些自由基、电解质离子和普通水分子，它们在生物大分子变化过程中的具体行为和生理作用等②。早在1958年就有人从电子结构的研究探讨钠离子和胍离子的生理效应③。现在，这方面的研究正在不断进展。

探讨生命过程的微观机理也是当前研究的一个重要方面。生物体在温和条件下稳定地进行各种复杂的自动变化、控制和调节过程，与酶催化和膜输导作用机制的关系；生物遗传信息以DNA分子双螺旋之一链为模板进行自我复制，这种从无序到有序的变化过程自动控制的原因、微观机制与宏观的生长、发育、繁殖、遗传和变异等生命现象的关系；分子致病和分子免疫的机理，等等。实际上，化学研究的领域扩大到生物的历史和未来、生物个体和群体、生物和环境的关系等各个方面。

（2）促进了化学本身理论和方法的发展

分子生物学方法应用于化学，如酶法分析、酶促合成、膜透析、酶催化等方法，在化学实验和化工生产中同化学方法互相结合、相互补充，促进了化学分析和化学合成等方法的发展。

正如在生物学实验中应用化学试剂，化学实验中也应用到生物试剂。例如，1960年，美国化学家卡那恩通过巴氏杆菌无细胞提取液实现固氮，使生物化学固氮研究从细

---

① M.Calvin, *American Scientist*, Vol. 63, No. 2, 169 (1975).

② （瑞典）A.利马-德-法利亚：“分子生物学向何处去？”，载《世界科学译丛》第一辑，1978年，92页。

③ L.勃罗尼：“从电子结构来看钠离子和胍离子的生理效应”，载《分子生物学》，科学出版社，1965年，154页。

胞水平前进到无细胞（接近分子）水平。

（3）对化学仿生学的影响

分子生物学的发展，对化学模拟生物固氮、化学模拟光合作用、化学模拟酶催化反应、化学模拟生物膜转换和输导物质、模拟基因贮存和传递信息等，都有很大的启发和影响。例如，几乎所有生物膜都处于介晶状态（即液晶），它与生命基本过程（物质代谢、能量转换和对刺激的反应等）密切相关。在生物膜里，一些偶极矩较大的长棒状和板状分子有序地排列着，形成液晶，它对光、电、热等外界刺激很敏感。某些功能蛋白质就浸浮于液晶双分子层之中，随着外界刺激进行迅速而复杂地适应性变化，执行相应的生理功能。现在液晶的制备和应用已经广泛进入人们的生产和生活之中。再如，一个大肠杆菌的基因只有针尖的万分之一那么大，它是单链生物大分子，它能记载的“密码”相当于一部中篇小说。如果实现人工模拟生物基因，其实际意义将是不可估量的。此外，还有DNA的切割、重组对“分子设计”的启示等。

化学与生物学的关系是如此密切，以致在研究生命这个对象时，化学和生物学往往很难分开。现代化学教科书和生物学教科书中，有相当一些对象相同、理论相近、方法相似的内容。在生物学和化学的论文中，彼此互相引用也司空见惯。最近，瑞典皇家科学院确认分子生物学亦属于化学[1]，诺贝尔化学奖多次授予分子生物学方面的研究成果；而荣获诺贝尔生理学及医学奖的项目，涉及化学问题的也不在少数[2]。

化学在分子生物学的形成和发展中起到重要作用，而分子生物学的发展又促进了生物学和化学各自的深入发展。分析分子生物学形成和发展的历史，以及化学与生物学之间的关系，能够得到许多有益的启示。如果考虑到其它一些相关学科和技术在分子生物学形成和发展中的作用，以及分子生物学的发展对它们的影响，就会发现，相关学科互相交叉、渗透又相互结合、补充，形成新的边缘学科。而这些边缘学科的发展，反过来又促进相关学科各自的发展。可以认为，高度分化又高度综合是现代科学发展的重要特征之一。

曲 行 文

5. 化学与化工

化学和化学工程既有区别，又有密切联系。正确地认识它们的内在联系，并加以区别和妥善处理，才能促进它们的发展。

化学和化学工程的区别

化学和化学工程在研究对象、任务、内容、功能和作用等方面都有区别。一般认为，化学是分子的科学，就是说，化学是研究物质分子及其聚集态的组成、结构、性质和变化规律的科学。此外还有许多不同的化学定义(见本书6—7页)。其实各种提法虽有某种差异，但任务是类同的，就是认识和说明自然界物质组成的相互转化和运动规律。

---

① 《中国百科年鉴》，中国大百科全书出版社，1981年，16页。
② 《中国百科年鉴》，中国大百科全书出版社，1980年，677—681页。

因此化学科学是人类的一种认识活动，作为认识活动的产物，就是化学知识体系。它是一种知识形态的东西，属于社会的精神财富。现代化学已经发展成一个庞大的体系，实验和理论是认识的主要手段。

化学工程包括化学工程技术和化学工程学双重含义①。化学工程技术是关于化学类型生产中各种操作和过程的研究与开发，化工装置和设备以及化工厂的设计、建造和操作管理的一门综合技术。例如，合成氨技术、反应器设计、化工厂水质处理、膜分离过程和离子交换等。化学工程学是化学工程技术的理论基础，它是研究化工类型生产过程和设备中共同的基本规律的一门技术科学。它的内容主要包括化工数学、化工热力学及化工基础数据、传递过程原理、化工热过程、扩散分离过程、非均相混合及分离、化学反应工程、化工动态学及过程最优化控制以及生物化学工程等。一般所说的化工，即化学工程，包括化学工程技术、化学工程学和化工生产。化学工程的任务是在化学理论研究的基础上，经过中间试验，把化学研究成果转移到化工生产中去，满足社会对产品的需要。就是说，化学工程是在大范围内实现自然界物质的相互转化，因此它是人类的一种实践活动。它是劳动技能、生产经验和化学理论的物化或转化，是一种物质形态，是人们常说的应用学科的一部分，因此它创造社会的物质财富。当然，任何一项化工技术都蕴含着一定的科学原理，每项技术创造都符合一定的客观法则。

从化学和化学工程的功能和作用上看，两者也是不同的。化学的功能和作用主要表现在三方面：一是在整个自然科学体系方面。化学是中间环节，它处于物理学和生物学之间，具有承上启下的作用。在各种运动形式中，化学运动形式介于物理运动形式与生命运动形式之间。化学与物理学、化学与生命科学相互影响互相促进，推动着自然科学的发展。二是在实践方面。化学是一种潜在的生产力，它能够比较迅速地转化为直接生产力。化学作为一种理论体系本身是一种生产力，但不是直接的生产力，而是潜在的生产力。只有作为劳动力的人掌握了化学知识，提高化学理论水平，把化学理论运用于化工生产中，才转化为直接生产力；作为劳动工具的化工机器设备都是化学理论的物化，其中都凝结着化学理论，通过化工机器设备才把化学理论转化为直接生产力；作为劳动对象的化工原料、材料，要靠化学理论才能应用于生产，变成社会财富。人们常说，化学在解决人类面临的能源、人口、食物、环境等重大问题上将起重大作用，但是只有经过转化之后才能起到这种作用。三是在思想观念方面。化学极大地影响了人们的哲学思想。在古代原子论的基础上形成了古代朴素唯物主义自然观；燃素说曾使一些化学家思想陷入形而上学的机械论；尿素的人工合成在一个方面打破了形而上学自然观的缺口；十九世纪末二十世纪初，化学和物理学的一系列伟大发现，更加证明了辩证唯物主义自然观的正确；现代化学发展的特点说明了宏观和微观、静态和动态、定性和定量、纯学科和边缘学科等辩证关系，丰富了辩证唯物主义自然观。因此，化学思想的发展影响了这个时代哲学思想的发展。

化学工程的功能和作用主要表现在以下三方面：一是促进化学理论和科学理论的发展。化学工程既然是人类的一种实践活动，那么它必然是化学理论建立的基础之一。化工实践为化学积累了经验，提出了研究的课题，提供了研究的手段和检验、应用化学理

---

① 陆震维、张先润："化学工程的发展和展望"，载《化工进展》1982年第1期，20页。

论的场所，因此，化工实践直接促进了化学理论的发展。如对天然高分子改性的研究，导致了高分子化学理论的建立。化工实践还给其它学科提出了一些理论问题，促进了这些学科理论的发展。如火药用于火炮，人们在研究炮弹运动中，促进空气动力学的研究及抛物体运动的研究，从而促进了物理学的发展。二是促进社会经济的发展。化工技术是提高社会劳动生产力的一个重要手段，是增长社会财富的一个源泉，促进社会经济发展的一个动力。十九世纪德国从煤焦油化学工业起家，发展了染料、制药、香料、人造丝等化工技术，促使科学技术得到迅速发展，也促进了经济的迅速发展。德国从1860年进口天然染料，到1900年转为大量出口合成染料，每年净得一亿马克外汇 。高分子工业为人类创造出一代新材料，合成纤维将补充和取代天然纤维，合成橡胶将逐渐取代天然橡胶在人类生活中的地位，塑料也将渗透到国民经济的一切部门，在结构材料中将取代钢铁的主宰地位。有人称当代为“高分子时代”，这种说法并没有概括现代科学技术的全貌，但却从一个侧面反映了当代高分子技术对社会经济的影响。三是为马克思主义经济理论提供依据，促进社会革命。马克思在《机器。自然力和科学的应用》一书中，阐明资本主义应用机器的前提和后果时，特别注意了化学的因素，引证了染色、漂白、造纸作坊的许多生产情况及工人的生活状况，作为建立他的经济学理论的依据。马克思非常重视李比希用化学观点研究农业所取得的成果，认为“李比希的不朽功绩之一，是从自然科学的观点出发阐明了现代农业的消极方面”②。马克思在谈到地租理论问题时指出：“德国的新农业化学，特别是李比希和申拜因，对这件事情比所有经济学家加起来还更重要”③。如果说十九世纪化学原子论和元素周期律等化学理论为马克思主义哲学的建立提供了自然科学的依据，那么，十九世纪炸药制造、肥料制造等化工技术，为马克思主义经济学的建立提供了许多生产技术上的依据。“科学是一种在历史上起推动作用的、革命的力量”④。技术在历史上直接推动了革命的发展。社会革命中使用的枪炮靠化工技术提供火炸药。我国火药生产传入欧洲，为新兴资产阶级战胜封建阶级起了很大作用。正如马克思所说：“火药、罗盘针、印刷术——这是预告资产阶级社会到来的三大发明。”⑤

化学和化学工程的区别，还在于它们各自具有相对独立性。

这里所谈化学的相对独立性，是指化学对化学工程的独立性，在一定条件下，化学的发展可以不受化学工程的影响和制约而独立发展。这种相对独立性表现在以下四方面：一是化学内部矛盾运动促进化学的发展。主要是新事实与旧理论的矛盾，如金属煅烧增重的事实同燃素说的矛盾；还有理论体系内部的矛盾，如化学元素概念同“四元素说”的矛盾，燃烧的氧化学说同燃素说的矛盾等。二是化学和其它基础学科之间的矛盾。它们的相互渗透形成一些化学新分支，如物理化学、生物化学、量子化学、计算化学、分子生物学、化学仿生学、激光化学、宇宙化学等。三是化学的继承和发展。这种关系突出表现在化学革命和突破中。化学中的每一新发展，都是在批判、继承以往化学

---

① 杨沛霆：《近代科学技术的继承和发展》，科学技术文献出版社，1978年，23页。
② 马克思：《资本论》（第1卷），人民出版社，1975年，553页。
③ 《马克思恩格斯全集》（第31卷），人民出版社，1972年，181页。
④ 《马克思恩格斯选集》（第3卷），人民出版社，1972年，575页。
⑤ 马克思：《机器。自然力和科学的应用》，人民出版社，1978年，67页。

成就的基础上取得的。如，燃烧氧化学说代替燃素说，原子学说对古代原子论的发展等。四是化学有自己的体系结构，如形成的所谓“四大化学”和“四大力学”及其它分支学科等。

化学工程的相对独立性，是指化学工程对化学的独立性，在一定条件下，化学工程可以不受化学理论的影响和制约而独立发展。当然这不是说化工技术的发展和化学理论没有关系，而是说化工技术发展不完全依赖化学理论，化学理论对化工技术不起决定作用，近代化学工程发展突出表现了这一点，现代化学工程的发展也同样如此。这种独立性也表现在四个方面：一是化学工程内部诸要素，如原料、材料、机器设备、控制和工艺的矛盾运动促进化工技术的发展，表现在原料路线的改变决定化学工业的发展方向，工艺流程的改造和发明往往强化生产过程和开拓新领域，催化剂的开发导致化工生产的重大革新，化工机械设备的发展是化学工业发展的保证，自动控制是实现工艺过程连续化和充分发挥工艺过程有效性的手段。二是化工技术的转移，表现在化工技术从一个国家转移到另一个国家，如我国引进的大型石油化工装置；一项新技术从化工转移到其它行业，如制氧技术由化学工业转移到冶金工业，高压超高压技术从化工转移到原子能工业；一项新技术从其它行业转移到化工行业，如电力技术向化工的转移，电气控制移植到化工形成化工过程控制技术等。三是化工技术的继承和发展。这种关系突出表现在化工技术革命和技术革新中，如化工工艺过程的革新和改造，从间歇操作到连续操作，从人工控制到自动控制，规模从小型到大型等。四是化学工程学有自己独立的体系结构，如形成独立的化工热力学、化工动力学等。

化学和化学工程的联系

化学和化学工程的相互联系和相互影响，是随着化学和化工技术发展水平，在不同的历史时期呈现质的不同，表现为随历史的发展而逐渐相互接近、相互依赖、相互融合。古代化学知识和化学工艺主要是以实用化学形式的结合；近代主要是化工生产、化工技术向化学理论的转化；现代主要呈现出化学理论向化学工程进而向化工生产的转化。

（1）古代化学知识和化学工艺以实用化学形式的结合

化学发展初期表现为实用化学形态。人类最早使用火是不自觉地运用了化学知识。以后，制陶，制玻璃，冶炼金属，酿酒，制醋，从植物中加工制染料；利用漆树加工制作油漆等，都是手工业化学生产。工匠的这些技能就是最早的化工技术，工匠的操作方法就是最早的化学工艺。这种技能和方法来自利用自然、改造自然的经验，实用性是它的显著特点。工匠在观察和实践的基础上初步认识了金、银、铜、锡、铅、汞、硫和碳等元素，和一些化合物的物理性质和化学性质，从他们所制成的化学物质中，“表明他们已经认识氧化和还原的一些一般原则，并且已能加入或除去如硫和氯等的非金属”[1]。这些都是实用化学知识。由于古代生产力水平低，生产规模小，工匠们的这种认识还只能停留在感性的阶段，还不能提高到理论阶段上升为化学理论。

古代，哲学同自然科学没有分化，某种意义上说，自然哲学就是当时的理论自然科

---

① 贝尔纳：《历史上的科学》中译本，科学出版社，1983年，70页。

学。古代哲学家从直观出发，在总体上观察自然界，从自然界本身的事物来说明整个世界。亚里士多德在综合前人对万物的本原提出的朴素看法基础上，提出了“四元素说”。古希腊的留基伯和德谟克利特提出了古代原子论，以后伊壁鸠鲁“已经按照自己的方式知道原子量和原子体积了”①。这种朴素的物质构造学说是最早的化学理论。它虽然也来自人们的观察，但具有很强的思辨性和猜测性，它不是直接来自工匠们的经验。所以，这时的化学理论和化学工艺基本上是独立发展的。

对于炼丹术或炼金术，如果不考虑那些神秘荒诞和隐奥莫测的内容，我们可以从有关著作中看到许多关于化学工艺、操作技艺、设备和化学方面的知识。如氧化还原反应、置换反应、无机合成，对硫、汞、硝石、矾土、雄黄等物质的物理和化学性质有了认识；还积累了许多操作技术，如蒸馏、过滤、升华、结晶、焙烧等；发明了不少设备和器具，如平底蒸发皿、焙烧炉、风箱、坩埚、烧杯、过滤器、勺子、铁剪子、锉等。有人认为“这时理论化学和实用化学第一次彼此结合起来”②。可以把炼丹术看作实用化学知识和化学工艺的结合，但这种结合只是化学和化工的原始形态的结合。

（2）近代化工生产、化工技术向化学理论的转化

近代化工生产、化工技术向化学理论转化的过程是缓慢的、艰难的和复杂的。化学理论对化工生产、化工技术的影响经历了由间接到直接的过程。

由于炼金术以亚里士多德的“四元素说”的消极面为理论基础，逐渐成为化学发展的障碍。因此化学向实践方向发展，出现了药物化学和冶金化学等，使化学工艺得到了很大进步。波义耳总结了一系列新的实践，批判了物质由“水、土、火、气”或“汞、硫、盐”组成的说法，提出了科学的化学元素概念，这是化工实践向化学理论的第一次转化。十七世纪，欧洲工业生产有了较大的发展，冶金、焦炭、烧石灰、制陶、玻璃、肥皂等工业的发展，要求从化学理论上解释燃烧现象的本质。就是说，客观上出现了化学工艺向化学理论转化的要求。但是由于当时生产水平和实验条件的限制及机械论自然观的影响，还不能揭示燃烧现象的本质，因而出现了燃素说，使化学工艺向化学理论的转化遇到了困难。经过百年的缓慢发展才克服了困难，完成了转化，建立了燃烧的氧化学说。由于生产的发展提供了许多实验仪器，在正确的理论思维指导下，通过实验发现一系列新气体，特别是氧的发现，从而完成了这个转化。燃烧氧化学说的建立，揭示了燃烧的本质，说明了生产中提出的实际问题，但还不能直接用于指导生产。十八世纪以前的酸、碱、盐化工工艺和化工生产，实质上不是以化学理论为基础的，而是以实际经验为基础的。

这个时期，道尔顿原子学说、化学元素周期律的建立，虽然与化工生产和化工技术有关，但是它们都是建立在实验的基础之上的。就是说，是化学理论相对独立发展的结果，而不是由化工技术转化而来的。

十九世纪，煤焦油的工业利用促使苯的环状结构学说的建立，有机结构理论与苯的环状结构学说又指导了有机合成工业的发展，生动体现了化工生产、化工技术、化学理论相互转化的关系。十九世纪初，人们从煤焦油中分离出了苯、甲苯、二甲苯、萘、蒽、苯酚、

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，28—29页。
② 〔美〕亨利·M·莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，42页。

苯胺等重要芳香族化合物。人们又以这些芳香族化合物为原料，合成了多种染料等有机产品。在生产技术上取得这些成果的同时，化学家认识到必须首先测定这些物质的组成和分子量，以及这些物质与其它物质反应生成的新物质的性质和组成。而要解决这些问题，必须从理论上给予阐明，将实践转化为理论。适应这种要求，凯库勒提出了苯的环状结构学说，完成了这个转化。苯的环状结构学说反过来又指导了人们认识到芳香族化合物在结构上的共同点，就是都含有苯环结构。在认识了这些化合物结构以后，又用人工方法合成了多种染料、药品、香料、炸药等，并实现了工业化生产。这充分体现了理论对于实践的指导意义。

近代化工生产、化工技术和化学理论的这种相互联系和转化的基础，首先是生产发展的影响。十八世纪末、十九世纪初，由于冶金工业的发展，需要大量焦炭，而生产焦炭时产生副产物煤焦油和煤气。随着炼焦工业和煤气工业的发展，煤焦油的堆积越来越严重，它被当作废物扔掉，污染环境，造成公害，因此煤焦油的利用就成为当时生产中迫切需要解决的一个重要问题。正是生产的这种推动，才出现了从煤焦油分离各种有机产品的分离技术，以至到十九世纪中叶形成了以煤焦油为原料的有机合成工业。生产和技术的发展又推动了理论的发展，所以生产发展的影响是最根本的。

其次是实验技术发展的推动。研究煤焦油的工业利用，开始都是在实验室中进行的。在实验室先后合成了各种染料、香料、杀菌剂、解毒剂，这些技术在实验室中突破以后，逐步推广到工业上。如，德国化学家格雷贝和里伯曼首先通过实验弄清了茜素的结构，然后用人工方法合成了这种天然染料，他们又同卡罗合作，经过多次实验发现了适于工业生产的新合成方法，又迅速实现了工业化生产。

第三，有一批既有理论又有技术的化学家的促进。在化学理论研究和应用研究中造就了一大批才华横溢的化学家，他们不但在一些化学理论上作出了贡献，还精通化工技术，善于把两者紧密结合起来。英国化学家帕金，于1856年以工业苯胺作原料在实验室中合成了苯胺紫，发现它是一种实用价值很大的染料，接着就设计了一个从煤焦油中提取的苯为原料生产这种染料的工业化生产方案，1857年就投产了。虽然帕金合成苯胺紫时，苯的环状结构学说还没有提出，但他能够将实验结果迅速推广到工业生产上去，开创了煤焦油化学工业。这说明，具有两种能力的化学家在化学、化工结合上的重要作用，他们能把科学发现这种潜在生产力迅速转化为直接生产力。

第四，在大学教育中把化学理论和化工技术相结合。当时出现大批既有理论又有技术的化学家，同大学教育是不可分的。一些教授一方面是探索未知领域的理论化学家，另一方面又是工程技术上创造发明的工程师。他们纷纷被化工企业聘请为顾问。这些人不仅用科学方式指导工厂向前发展，而且还把工业生产中遇到的问题带回实验室，用这些新课题来训练学生。他们在工业实验室里看到越来越多的半成品，也就是合成某些新化合物的中间产物。而在大学实验室里对这些中间产物进行的研究，往往就是发明前所未有的新合成的起点①。培养出的年轻化学博士又到新兴的化工企业任职。这些人起着由化工生产到化工技术到化学理论，和化学理论到化工技术到化工生产双向转化的作用。

---

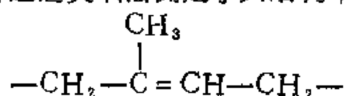
① 〔美〕亨利·M·莱斯特，《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，241页。

（3）现代化工生产、化学工程和化学理论的整体化发展

现代科学技术的一个重要特点是整体化发展。现代化工生产、化工技术和化学理论的关系不同于历史上任何时代，也表现为整体化发展的特点。这种整体化发展的一个重要表现为生产—技术—科学的相互转化，特别表现为科学—技术—生产的转化。下面就用高分子化学和高分子化学工程发展的历史说明这种转化。高分子化学和高分子化学工程是现代化学和现代化学工程的重要组成部分，不仅在化学和化工方面，而且在科学、技术中也有一定的代表性；它们之间的相互关系也具有代表性，可以代表现代化学、化工的一般关系，也可以在一定程度上体现现代科学、技术的相互关系。

首先一方面，是高分子化工生产、化工技术向化学理论的转化。十九世纪中叶，由于工业上和生活上的需要，开始研究天然高分子的化学改性。在天然橡胶改性方面，解决了加工工艺中的溶解问题，发明了硫化改性工艺，技术上的改进促进了橡胶工业的兴起和发展。在天然纤维素的改性方面，制得了硝化纤维、人造丝、粘胶纤维、醋酸纤维，并很快投入工业生产。本世纪初，研制成功第一种合成塑料，即酚醛树脂，并在许多国家投入工业化生产。这一时期，还从双烯烃制得了合成橡胶，并建立了工厂。但在当时，无论是天然的还是合成的高分子化合物，其结构还不清楚。生产和技术的发展，推动人们对高分子的认识从表面现象深入到内部本质，从经验上升到理论，提出了大分子的概念。

大分子概念是经过不同观点的激烈斗争逐渐形成和确立的。十九世纪末，由于人们习惯于用已经建立的有机化学和胶体化学理论研究物质结构，一些人认为天然高聚物是由许多小分子通过物理力聚集成的胶体体系。二十世纪初，天然橡胶的经验式和异戊二烯的结构已经确定，并通过臭氧法测定了其结构单元为：



但当时还不能通过化学方法确定端基，所以很难想象橡胶分子是成直链形式的。于是1904年哈里斯用聚集理论提出橡胶分子的环状结构形式。但是用它很难解释生产和实验中涌现的大量事实。1920年，施道丁格提出高聚物是原子以共价键形式连接成的大分子的观点，1922年他作了天然橡胶加氢实验，发现其"溶液"仍然具有胶体溶液的性质。他在1924年明确提出了天然橡胶分子是高分子量的大分子概念。通过X射线法研究纤维素，1926年斯本先和多尔指出，纤维素也是链状大分子结构，使大分子的概念得到进一步证明。1930年，施道丁格又发现通过高分子稀溶液的粘度测定高分子化合物分子量的方法。1932年，他发表了第一部高分子化合物专著，高分子化学建立起来了。

从高分子化学的建立，可以看出化工实践向化学理论的转化过程。在化工生产实践和化学实验的基础上逐渐排除错误的概念，形成了科学的高分子概念，这就抓住了高聚物的本质和规律。这是人们认识过程的一次飞跃，标志着人们对高分子的认识，由感性阶段深入到了理性阶段；又通过高分子概念作为先导产生了高分子化学，转变为高分子化学理论。

另一方面是高分子化学理论向化工技术、化工生产的转化。高分子化学理论建立以后，导致许多高分子技术的发明，从而促进了高分子化学工业的迅速发展。卡罗瑟斯从1929年开始系统地研究了缩合反应，从而导致1935年试制成功尼龙-66，并于1938年实

现了工业化。他之所以能够通过熟知的二元酸和二元醇的缩合反应，合成分子量超过二万左右的聚合物，主要是采用了有机合成的新技术、新工艺，使理论通过技术这个中间环节转化为直接生产力。三十到四十年代，由于自由基聚合反应的基本理论逐步确立，在这个理论的指导下，在技术上开发了许多加聚物，如开发了聚氯乙烯、聚苯乙烯、聚甲基丙烯酸甲酯（有机玻璃）、丁苯橡胶、丁腈橡胶、高压聚乙烯等技术，并投人工业化生产。

在高分子化学理论向技术和生产的转化过程中，又不断地阐明高聚物聚合反应机理，进一步丰富和发展了高分子理论。在转化中，又作出新的科学发现和技术发明。这种发现和发明在两个方向上起了重大作用，一是进一步完善、丰富和发展原有理论；二是加速向技术和生产的转化。齐格勒和纳塔在催化理论和催化技术上的贡献，就是一个最好的说明。1953年，齐格勒在从事金属有机化合物的研究中，发明在常温常压下用有机铝-钛催化剂制得电绝缘性、柔韧性、耐磨性优良的聚乙烯。这一发明具有双重意义，一是改造原先制取聚乙烯需要的1400大气压的高压技术，再进一步转化为生产过程，形成新的生产力；二是在高分子化学理论上，丰富和发展了新型催化理论，这种新的催化理论又指导合成了新的高聚物。因此，正是以齐格勒的新发明为媒介，使理论—技术—生产相互结合、相互渗透、相互促进、彼此转化。1955年，纳塔又对齐格勒的催化剂作了改进，应用于丙烯的聚合，仅10个星期就得到了高产率、高结晶度、耐热的聚丙烯。这一技术上的改进又具有双重意义，一是这一技术转化为理论，产生了定向聚合理论和立构规整高分子的结晶学说；二是把这一理论转化成新的技术，进一步转化为生产力，把它应用于橡胶的合成，制得了天然合成橡胶。这在高分子科学发展史上具有深远意义。这又是理论—技术—生产的相互结合、相互渗透、相互促进、彼此转化。

当然，在高分子化学发展中，理论、技术、生产的关系是非常复杂的，除了上述的转化关系外，还有其它学科、其它技术的渗透和影响，实验手段和工具进步的促进等。

化工生产、化工技术和化学理论的相互关系，给我们如下几点启示：

首先是在理论上。化学理论和化学工程是有区别的，各自有相对独立性，也有不同的发展特点。但是，现代化学理论和化学工程又是相互联系、相互渗透、相互转化的。它们这种关系的基础，在于它们的社会功能具有基本一致的方面，即它们都是社会生产力，虽然表现形式是直接的或者是间接的，但只有转化为直接生产力才有强大生命力，才能得到较快的发展。因为人们从事化学、化工技术研究的目的，归根结底是要促进生产力的发展。我们从理论上明确这一点，才能深刻理解加强应用科学研究，重视基础科学研究的方针，懂得自己的工作在这一整体发展中的地位和作用。

其次是在实践上。在化学和化学工程的发展中，实验或试验曾起了重要作用。观察实验中的发现导致化学理论的建立，当然这种实验发现既需要经验知识又需要理论指导；试验中的发明导致化工技术原理的建立，进而转化为化学理论，当然这种试验发明也需要理论指导。试验发明往往用经验的方法，通过技术直接转化为生产力。因此，既要看到理论的重要，又要看到实验或试验的重要。如果轻视实验或试验，甚至否定实验或试验，那么化学理论的发展就没有基础，化学工程及化工生产也不能很快发展。

第三是在人才培养上。要有意识地发现和培养一批既有理论又有技术的化学家，即化学工程科学家。多年来，我国已培养了一大批不同类型的化学家和化学工程师，今后

应该更多地培养这样的人才，才能适应我国化学、化工发展的需要。但是，根据化学、化工发展的历史经验，现代科学技术发展一体化特点和我国的实际，有意识地发现和培养化学工程科学家或“战略工程师”更为重要。这种人是指那些具有雄厚的理论基础和抽象思维才能的工程师，或化工部门的“思想家”。他们善于把化学和化工结合，善于跨学科开辟新的边缘领域，善于迅速发现现有系统和设备中的问题，善于把一些看来似乎毫不相干的概念用新的方式关联起来，以达到工程实用的目的。他们的工作基本上是创造性的智力工作。他们的成果贡献主要是新概念的发现，化学、化学工程发展战略思想的提出，新的技术领域的开辟①。当代化学、化工发展特点需要这样的人才，同时也为这样人才的成长创造了条件。只要我们认真按化学、化工发展规律去办，按党和国家的政策去办，具有我国特色的化学、化工技术人才一定会大批涌现出来。

边 克 忠

6. 化学与社会的进步

在人类社会发展的历史进程中，科学技术起着十分重要的作用，正如恩格斯所说：“在马克思看来，科学是一种在历史上起推动作用的、革命的力量。”② 而化学与其它科学技术一样，它本身是一种生产力，可以直接参加到生产活动中去，促进生产的发展，推动社会的进步。

化学与社会生产

化学来源于生产，反过来又在促进生产的发展中发挥巨大作用。放射化学的研究、原子核裂变的实现，开辟了原子能利用的新时代；催化剂的出现和研究，引起了化学工业的巨大革新；高分子聚合物的研究和发展，导致了一个崭新的材料工业部门的产生，影响到人们生产和生活的各个方面。

科学变为直接生产力，是近代科学技术革命的特点。从近代化学的发展可以看到，化学研究往往来源于生产的需要，又走在生产的前面。由于在理论和实践上，解决了生产中急需解决的问题，并进一步把它运用到生产中去，从而引起了生产上的革新。

从近代化学工业的发展来看，没有扎实的化学基础理论研究，就不可能有先进的化学工业。氨的合成便是化学与生产相结合的一个典型例子。

利用氮、氢为原料实现合成氨工业的发展，曾经是一个比较困难的课题，从第一次实验室研究到工业化投产，前后经历了一百多年的时间。1795年，希尔德布兰德就曾试图在常压下合成氨，其他人也曾试过50个大气压下的条件，但由于反应过程太慢，结果都失败了。1823年，德贝莱纳开始尝试用催化剂，但长时期仍没有重大突破。

1850—1900年间，由于物理化学的研究有了巨大的进展，质量作用定律、化学平衡原理及化学动力学等基础理论的研究成果，为解决合成氨研究中所遇到的困难指明了方向。这时人们认识到：氮、氢制氨的反应是可逆的，增加压力会将反应推向生成氨的方向，提高温度会将反应移向相反方向，但温度过低，又使反应速度过小；而催化剂的应用对获得有实际价值的反应速度，则是一个主要手段。由此为氮、氢制氨的反应，提供

① 杨友麒：“我们需要什么样的工程技术人才”，载《光明日报》1983年12月8日。

② 《马克思恩格斯选集》第三卷，人民出版社，1972年，575页。

了理论基础[1]。

到了二十世纪初期，很多化学家积极从事合成氨工艺条件的试验和理论研究。其中德国的哈伯从理论上计算了不同温度下氨的平衡常数，标出了平衡产率，并做了多次试验。其结果不是失败，就是反应速度很慢、产率很低。这时，由于能斯特发现了热力学第三定律，对于合成氨起了重要作用。他详细、准确地从理论上讨论了合成氨的最佳条件，为化工生产提供了科学的理论根据，于是在1913年，世界上第一个合成氨厂在德国巴登苯胺纯碱公司建成并投产。以后又进一步改进和提高产量，逐步使合成氨发展成为大型的现代化生产。

由于合成氨的高温、高压条件对设备要求比较严格，给生产带来很大不便，而成本又较高。因此，自六十年代以来，科学家们提出了应用化学方法模拟生物固氮过程，在常温、常压或比较温和的条件下，把空气中的氮固定下来，变成氨和其它有用的含氮化合物。这比工业上高温高压的催化过程，将有更大的经济价值。所以，这个诱人的目标，引起了国内外许多学者的浓厚兴趣。

我国化学家和生物学家，在化学模拟生物固氮的研究方面，已经做了大量工作，并取得了显著成绩和进展。这是既有理论意义又有重大经济价值的一项研究工作。这一问题得到解决，将是化工生产上的一次革命，它必然为工业生产创造新的生产条件，提出新的生产流程、开辟新的研究领域，将会大大改变现代化工业生产面貌，有力地促进农业和工业现代化的发展。可见，科学研究应该走在生产的前面，化学在与国民经济关系十分密切的研究项目中，起着重要作用。

化学与四化建设

化学作为基础学科之一，在广泛联系实际的基础上，不断地出现许多新思想、新概念、新理论、新技术。随着化学与其它学科的渗透与交叉，又不断分化出许多新的分支学科和边缘学科，如宇宙化学、地球化学、量子化学、生物化学、分子生物学、工业化学、农业化学、医药化学、环境化学等。这些学科是随着化学理论和方法在各方面的应用和结合而产生的，在科学、生产和生活的各个方面，将产生巨大影响。

化学科学的繁荣，促进了若干基础学科和应用学科的发展，并为国民经济许多生产部门的发展，打下了理论基础和技术基础。在我国实现四个现代化的进程中，化学占有不可忽视的重要地位，并能发挥多方面的巨大作用。

实现农业现代化，首先要提高农产品的单位面积产量。而要提高单位面积产量，就离不开化肥和农药。比如，先进的农业耕作技术中有一种免耕法，可以大大节省劳动力、提高生产率。但免耕法需要合适的除草剂，而且不同杂草要求不同的除草剂，并且这种除草剂本身最好又是肥料。此外，也还需要适量的杀虫剂、杀菌剂和植物生长调节剂。植物生长调节剂有时可使农作物产量成倍地增长，并可提高产物质量和降低生产消耗，是农业发展的重要方向。我国农田面积大、作物品种繁多，而现有的化肥、农药的品种和数量却远远不能满足需要。要生产更多的优质化肥，要研制高效低毒无公害的农药和各种植物生长调节剂，没有化学和化学工业，是无法实现的。

---

① 《化学发展简史》编写组，《化学发展简史》，科学出版社，1980年，139页。

在工业现代化中，化学对开发能源、提供新型材料，起着关键作用。化学是材料科学的基础，也与能源基础工业和激光等新技术的关系极为密切，又与人民群众的衣食住行息息相关。离开化学的发展，就谈不到基础工业和新技术的发展。

种类繁多的材料，是建设和发展人类社会的基础。因此，人类文明的进步，时代的划分，往往以掌握和使用的材料及工具作为主要标志。而各种新材料的发明和应用，则需要依靠化学研究来实现，譬如象固体化学、结晶化学、热力学、表面化学等，都是材料科学的重要基础[1]。

我国现代工业的发展，涉及的领域和部门很广，化学的各分支学科如有机化学、无机化学、高分子化学、物理化学、分析化学、环境化学、石油化学、化学工程、辐射和放射化学等，都能结合我国工业现代化的发展和需要，作出应有的贡献。

实现国防现代化，必须有先进的空间技术和各种先进的武器。火箭、导弹、人造卫星、航天飞机、核潜艇、航空母舰等各种国防技术的发展，需要各种特殊结构的材料和高能燃料。例如人造卫星的材料，不仅要有一般轻质铝合金材料还要有特种复合材料、烧蚀材料和防热材料等。在卫星能源方面，不仅要研究化学电池，还需要研制和试验硅光太阳电池和燃料电池[2]。而这些材料和燃料的研制，则需要合成化学、结构化学、分析化学、化学热力学、化学动力学和核子化学等许多化学分支学科配合。

通过光化学、生物化学工作者对光合作用的研究，许多成果也可以应用于国防建设，例如，为航天飞机、核潜艇等密闭系统提供氧气和部分食物；利用活体和离体叶片不同的荧光光谱，可以鉴别用树枝掩护的军事目标；利用叶绿素特有的吸收光谱，可以有选择的接收人造卫星上发出的信号等等。

在科学技术现代化方面，我国要求在本世纪末，在各个学科领域内争取拥有最先进的科学实验设备，在技术上有重大创造，在理论上有重大突破，能有一批赶超世界先进水平的成果出现。而这就对化学提出了更多更重的要求。

现代科学技术发展的特点之一，是新技术日益被广泛应用。特别是电子计算机技术和激光技术的应用，已经和将在科学技术现代化中起着重要作用，而与此有关的计算化学、激光化学的发展和应用，将大大促进化学研究和化工生产的现代化、自动化与信息化。其中更具有战略意义的是信息技术和核技术，最新发展方向之一是采用化学分子记录，这种化学分子记录的容量，可能比现有的计算机容量大数百万倍。

随着现代化学的发展，其它一些新的化学分支学科如量子化学、固体化学、生物无机和生物有机化学、分子生物学、细胞化学和仿生化学等正在迅速发展，将对科学技术现代化做出更大贡献。

化学的发展与人类生活

与化学研究密切相关的化学工业产品，极大地改变着人类生活的面貌。在医药保健方面，在提供人们衣食住行等方面，都取得了巨大成就。没有化学和化学工业，就不可能从根本上延长人类寿命和为人们创造幸福、舒适的生活。

---

① 严东生：“无机材料发展的某些新趋势”，《化学通报》1982年第9期，14页。
② 武鹏：“中国的航天事业”，载《自然科学年鉴》，上海科学技术出版社，1982年。

随着高分子化学的发展，合成材料正在取代传统的木材、金属、皮革和天然纤维，并广泛应用于工农业生产和人类日常生活。随着“快速聚合”技术的研究，将来人类的衣服可不必经过成纤、纺纱、织布、缝制等过程，而会出现神话般的直接由原料变成衣服的“一步成衣法”①。在衣着性能方面，不仅会出现更加美观漂亮、穿着舒适耐用的衣料，而且还会增进人体的健康。例如能活血、消肿、杀菌、止血的衣料；能缓解、抑制肿瘤的合成纤维衣料；能防火、防原子辐射、耐高温的合成纤维；能自动调节温度、一年四季穿着都舒适、晴雨两用、能光敏变色的服装等等。

随着医用高分子的发展，可用高分子合成材料制造出各种人造器官，例如人工骨、软骨、肌肉、腱、角膜、人工喉、食道、胆道、尿道、人造皮肤、人工肺、肾、肝以及心脏起搏器与人工心脏等②。人造皮肤一旦获得成功，人类烧伤愈合速度将大大加快，痛苦的真皮移植将被淘汰。

人的身体是由化学物质构成的。生物化学是一切现代生命科学的基础。欲深入了解生物的发生、生长、生殖、遗传、代谢、衰老与进化等生命现象，都必须采用生物化学的原理和方法③。对免疫化学的研究，将有助于维持人体的正常代谢、预防疾病和抗衰老。在分子水平上研究生物衰老机制和抗衰措施，与人类幸福、社会进步和文化发展，都有着密切关系。研究各种营养素的作用机制、测定各种食物中微量元素和有害物质，根据不同年龄、不同人的需要，进行科学的膳食调配，对增进人民健康、预防疾病和延长寿命，起着重要作用。而这些问题的研究和解决，都离不开化学。

人类环境（空气、水和室外环境）质量的改善，涉及到许多与化学有关的问题；人民保健事业的进步和改善，日益增加着对化学的需要；能源问题的解决，化学家肩负着重任……。总之，化学与人民生活和人类进步息息相关，它会给人们带来健康的身体、美好的食物、优良的衣着，称心的用具和吸引人的住所及设施。实际上，化学给人类带来了愉快和舒适的生活。

化学与社会的未来

展望化学发展的美好前景，可以看到化学在人类社会和国民经济的发展中，越来越占有重要的地位和作用。

1976年，当时的美国化学会会长西博格就提出过：“化学是我们进步的关键”。1978年，日本化学家汇上不二夫预期：“二十一世纪是化学和化学工业的时代”④。两次荣获诺贝尔奖金的著名化学家鲍林预言：在未来的一百年内，化学将对人类健康福利做出更大贡献。随着人们对蛋白质和其它生物物质精细原子结构的认识和研究，将有效地攻克生物和医学方面的难题，在控制癌症、传染病和其它死亡病因，以及通过改善营养、改善环境而达到延长寿命和减缓衰老过程中，化学家将会做出重大贡献⑤。

1981年，中国科学院院长卢嘉锡在谈到化学发展前景时指出：随着化学研究在定

① 钟玉昆：《高分子合成材料》，科学出版社，1982年。
② 冯新德：“谈谈功能高分子”，《化学通报》1982年第9期。
③ 郑　集：“生命化学的展望”，《化学通报》1982年第9期。
④ 参见日本《现代化学》1978年第4期该作者所发表的文章。
⑤ L.Pauling：C&EN, April, 19,34 (1976)。

量、微观、动态等方面的深入发展，可以预期在今后若干年内，将大大加深对于化学反应动态特征，以及微观结构的化学规律等方面的了解，并能提高设计和合成具有预定性能，从而要求一定结构的化合物的能力和水平①。

我国高分子化学家王葆仁认为，“高分子”是划时代的材料。在人类历史的长河中，曾经历过石器时代、铜器时代和铁器时代。从二千多年以来，就材料来说，一直处于铁器时代。自从二十世纪中叶出现了高分子材料以后，可以说人类正开始进入高分子时代。“高分子”原料丰富、制造方便、品种繁多、应用广泛。随着对高分子结构与性能的深入研究，化学家们将沿着“分子设计”的方向，合成出具有指定性能的多种新型高分子材料。到那时，人类将真正进入高分子时代②。

还有的科学家认为，在本世纪最后的四分之一时间内，化学家们将要占领基础学科的中心舞台③。这是因为人类面临着一场挑战，即研究如何将十分小而又非常丰富的小分子变成大分子，以便用于获取燃料、生产食物和制造材料。而这方面的研究获得成功，对减缓甚至从根本上扭转全球性生存条件的恶化，将产生重大影响。

近几十年内，化学工业将以更大的速度发展，而且产品日新月异。据估计，到2000年，世界化工产品的贸易额将比1968年增长8倍，而其产品的50%将是现在世界上没有的。种类繁多的化工新产品，将不断地改变着世界的面貌。

到2000年，世界人口将达60亿，而陆地上现有的资源（食物、淡水和原料），将不能保证这样巨大的人口的需要，这迫使人们把眼光投向海洋。海洋中蕴藏着巨大的财富，海底有1000亿吨各种矿物，海水中有100亿吨铜、50吨铀、100亿吨黄金，以及数量巨大的各种海生植物和动物蛋白等。据估计，海洋能给人类提供的食物将超过农业耕种面积的一千倍。对海洋化学的研究和利用，将是人类向海洋深处进军的一个重要组成部分。

随着新技术革命的冲击，信息科学技术正在引起产业结构发生变化。人类将通过迅速收集、传递和处理信息，更有效地认识和改造世界。化学数据库及其信息系统的研究和应用，将对化学的发展产生深远的影响。

随着对生命现象本质的深入研究，国际上生命科学的发展非常迅速。分子生物学便是在物理学和化学的影响和渗透下而形成的一门新的学科④。分子生物学不仅对生物学基础理论的发展有着重要意义，而且在工、农、医药等生产实践中，将有许多重要应用。对酶的人工模拟、遗传工程、生物膜能量转换原理等方面的深入研究，将为人类进一步改造自然，开辟广阔的前景。其中有许多工作是需要生物学工作者和化学工作者合作来实现的。

对能源、粮食、材料的研究，将对世界长远需要产生积极影响，同时对我国四化建设发挥巨大作用。各国化学家从事这方面的研究工作，正与日俱增。可以预测，在今后几十年内人们将利用太阳能，从水中制取氢气；将通过一氧化碳和二氧化碳的还原，来合成燃料；现在日本已有报道在常温低压下合成氨成功；还将通过化学和其它学科的共

---

① 王治浩：“化学科学大有作为——访中国科学院新任院长卢嘉锡教授”，《化学通报》1981年第7期。

② 王葆仁：“高分子——划时代的材料”，载《现代科学技术简介》，科学出版社，1978年，411页。

③ 美国《工程与科学》，1977年第40卷第2期；转引自《社会发展和科学预测译文集》，科学出版社，1981年314页。

④ 邹承鲁：“分子生物学”，载《现代科学技术简介》，科学出版社，1978年，445页。

同研究，达到消除污染、美化环境、减少疾病、延长寿命……。

由此可见，当今时代，是一个振奋人心的时代、催人奋进的时代，也是化学家和化学工作者大显身手的时代。有志于化学事业的人，在辩证唯物主义思想的指导下，应用科学的方法论，肯定会在综合利用资源，合理开发和有效利用能源，研制新型材料，解决环境污染，推动医药事业，促进四化建设等方面，做出重要贡献。化学将在国民经济的发展中，越来越显示出它的重要地位和作用。

王　治　浩

7. 化学对哲学发展的贡献

哲学是关于自然科学和社会科学的概括和总结。自然科学是哲学的重要基础。化学是自然科学的历史悠久的基础学科之一，对哲学的发展曾经起过并且还将起重要的作用。哲学史上的每一重大突破，化学科学都曾对之作出过贡献。

早期实用化学为古希腊哲学的产生
提供经验素材

恩格斯曾经指出："在希腊哲学的多种多样的形式中，差不多可以找到以后各种观点的胚胎、萌芽。因此，如果理论自然科学想要追溯自己今天的一般原理发生和发展的历史，它也不得不回到希腊人那里去。"①。可见，古希腊哲学在人类思想、科学文化发达史上占有十分重要的地位。古希腊哲学是思辨的、注重逻辑推理的，但无论多么思辨，它总是要有经验素材为依据。而这种思辨哲学的经验来源之一就是由早期实用化学工艺所提供的。

人类在最早的生产实践中就接触到火。人类祖先借助于火学会了用铜、青铜等物质来制作器具和其它生产工具等。这些活动在那时自然谈不上是化学，但这些实践活动正是尔后化学所赖以发展的前身。古代哲学家们用思辨和逻辑推理的方法去作出解释，去探寻万物生生灭灭、变化多端的原因，描述出"万物本性"的宇宙图景，于是反映到哲学家那里就提出了各种宇宙论图景。早在古埃及时期，埃及人使用"天铁"，这使古埃及的学者产生了这样的思想，即：铁既然是从天而降的，那么，天必定是由一个大铁盘构成的这种臆测的宇宙观。

古希腊哲学家从各种自然现象的相互转化中，认定必然存在着一种或几种基本的物质元素，由它（或它们）构成宇宙（或宇宙万物）。古希腊哲学家泰勒斯认为这种元素是水，赫拉克利特认为是火，恩培多克勒则认为万物由火、水、土、气四种元素构成。为了解释万物运动变化的根源，他又进一步提出万物都含有爱和恨两种成分。元素在爱的影响下结合，在恨的影响下分离。他的这种爱和恨思想成了尔后一种化学物质结合观念——亲和力论的先导。留基伯和德谟克利特又进一步认为火、水、土、气还不是宇宙万物的真正本源，也不是无数性质不同的各种现象的"种子"，认为它们本身是由更简单的单元组成的。这种更简单的单元就是原子。原子是占有空间的、不可分的、永不毁灭

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，30—31页。

的"实体"。一切物体都是原子和虚空的结合物。物质的结合和分离是由于原子的涡漩造成的。柏拉图接受了恩培多克勒的四元素说，并认为这些元素的原子具有特定平面组成的几何形状。柏拉图强调元素可以相互转化，并运用机械类比法说明化学变化。他运用元素变化的观念解释当时人所周知的那些无机界和有机界的观察结果，虽然这些都只是思辨观念，但对后来的炼金术起了重要影响。柏拉图的学生亚里士多德以整个早期希腊哲学思想为基础，进一步创立了一个首尾一贯的理论体系。他接受了恩培多克勒的四元素观念，认为物质的基本元素是热、冷、湿、干，它们成对组成四元素，即火、气，土和水。以上这些观念是后来物质结构研究的胚芽，又是古代希腊哲学家的宇宙观和物质观，对以后哲学的发展有很大的影响。但所有这些观念和学说，都是建立在对自然现象的直观基础上的，而自然界发生的各种化学变化现象，以及人们利用这些现象的早期实用工艺，正是孕育它们的基本经验素材。

近代化学促进近代唯物主义的发展和原子论的传播

原子论是近代唯物主义的理论核心。伽利略、弗兰西斯·培根和笛卡儿都接受物质是由微粒构成的学说，形成历史上的"微粒说哲学"。微粒说哲学克服了古希腊的纯思辨性质，越来越多地获得了实验的支持，成了哲学发展史上的重要阶段。

化学在近代唯物主义哲学的产生和发展过程中，有过积极的贡献。我们知道，古希腊的原子论仅仅是一种说明经验现象的直观猜测，并没有实验根据。使原子论观念建立在实验根据上，成为具有深厚根基的学说，其中化学家起了不可磨灭的作用。生活在十六、十七世纪称得上是化学先驱者的赫尔蒙特，通过化学操作和实验研究，认识到某些化学过程中有气体产生，指出了气体、可凝结的蒸汽和空气彼此间的区别，提出"气体是由不可见的原子组成，剧冷后彼此靠近凝结成小液滴"①。那时的化学先驱者们，通过自己的化学实践，从中意识到微小的原子在一系列化学反应中保持不变，并用原子概念来说明他们所观察到的各种现象。早在伽桑第之前，加齐姆·荣格就用原子概念解释了许多化学反应，他否认铁从硫酸铜中把铜置换出来是一种衍变，只承认这是原子的互变。

"把化学确立为科学"的波义耳，则通过自己的化学实践和理论，把机械论哲学大大向前推进了一步。他用微粒说观点解释自然界，摒弃各种神秘的、超自然的或人格化的力，力求用物质和运动的观念对所有化学反应和物理性质作出机械论解释。他用马德堡市长发明的抽气唧筒抽成"真空"，从而否定了笛卡儿认为真空不存在的理论，捍卫了彻底的原子论观点。道尔顿则首先确定了各种元素不同的原子量，从而奠定了新化学理论赖以建立的不可动摇的基础，捍卫并推进了以原子论为思想基础的唯物主义理论。

化学的成就在马克思主义形成中的贡献

马克思和恩格斯对化学给予了极大的关注，在他们通向辩证唯物主义世界观形成的道路上不断纳入化学所提供的经验和理论素材。恩格斯在《自然辩证法》一书的《导言》中，论述了天文学、地质学和物理学的成就向形而上学的自然观发起冲击之后，指

---

① 柏廷顿：《化学简史》，胡作玄译，商务印书馆，1979年，57页。

出："从拉瓦锡以后，特别是从道尔顿以后，化学的惊人迅速的发展从另一方面向旧的自然观进行了攻击。由于用无机的方法制造出过去一直只能在活的机体中产生的化合物，它就证明了化学定律对有机物和无机物是同样适用的，而且把康德还认为是无机界和有机界之间的永远不可逾越的鸿沟大部分填起来了"①。这说明恩格斯对化学在向旧自然观冲击而形成新自然观中的作用，给予了极高的评价——因为康德是第一位打开了形而上学自然观的缺口的，而化学的成就"填补"了康德观念的不足。

恩格斯首先着力研究了无机化学。他以波义耳、拉瓦锡，道尔顿和门捷列夫等人的理论成果为主，旁及无机化学的许多领域，包括当时正在兴起的电化学。他正确地指出了波义耳把化学确立为科学；他深刻地总结了氧化说代替燃素说的历史，并指出："普利斯特列和舍勒析出了氧气，但不知道他们所析出的是什么。他们为'既有的'燃素说'范畴所束缚'。这种本来可以推翻全部燃素说观点并使化学发生革命的元素，在他们手中没有能结出果实。但是，当时在巴黎的普利斯特列立刻把他的发现告诉了拉瓦锡，拉瓦锡就根据这个新事实研究了整个燃素说化学，方才发现：这种新气体是一种新的化学元素；在燃烧的时候，并不是神秘的燃素从燃烧物中分离出来，而是这种新元素与燃烧物体的化合。这样，他才使过去在燃素说形式上倒立着的全部化学正立过来了。即使不是像拉瓦锡后来硬说的那样，他与其他两人同时和不依赖他们而析出了氧气，然而，真正发现氧气的还是他，而不是那两个人，因为他们只是析出了氧气，但甚至不知道自己所析出的是什么"②。恩格斯关于氧气发现的这些精辟分析，对于今天从事科学研究和对科学发现的探讨以及有关科学发现的优先权争论问题的解决，依然具有重要的现实意义。

恩格斯还有一段论述值得我们充分重视。他说："在化学中，燃素说经过百年的实验工作提供了这样一些材料，借助于这些材料，拉瓦锡才能在普利斯特列制出的氧中发现了幻想的燃素的真实对立物，因而推翻了全部的燃素说。但是燃素说者的实验结果并不因此而完全被排除。相反地，这些实验结果仍然存在，只是它们的公式被倒过来了，从燃素说的语言翻译成了现今通用的化学的语言，因此它们还保持着自己的有效性"，"燃素说同拉瓦锡理论的关系"正如"黑格尔的辩证法同合理的辩证法的关系"③是一样的。当前西方科学哲学界掀起一股相对主义和非理性主义思潮，否定科学理论之间的连续性和继承性，认为前后相继的理论是不可比的、不可通约的。这种观点最突出地表现在美国科学史和科学哲学家托马斯·库恩所著的《科学革命的结构》一书中④。恩格斯关于氧化说和燃素说关系的论述是对这些错误思潮进行批判的有力武器，今天重温恩格斯的这些论述，使我们倍觉亲切。

恩格斯高度评价了门捷列夫化学元素周期律的发现，认为门捷列夫"完成了科学上的一个勋业，这个勋业可以和勒维烈计算尚未知道的行星海王星的轨道的勋业居于同等地位"⑤。

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，14页。

② 马克思：《资本论》第二卷第二版序，《马克思恩格斯全集》第24卷，20—21页。

③ 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，33页。

④ 该书中译本由李宝恒、纪树立译，上海科学技术出版社，1980年出版。

⑤ 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，51—52页。

恩格斯后来又转而研究有机化学的发展。他研究了李比希、维勒、凯库勒以及肖莱马等人的有机化学著作。他认真阅读过李比希的《化学在农业上的应用》一书，读过霍夫曼的《现代化学通论》，尤其是肖莱马的著作。他还与肖莱马讨论化学问题，征求肖莱马对自己理论观点的意见。在这些系统而深入的研究基础上，恩格斯引用有机化学的成果论证并阐发自己的哲学结论。

例如，恩格斯指出，无论在无机化学领域还是在有机化学领域，质量互变规律都是客观地、普遍地起着作用。他认为，门捷列夫元素周期律的发现，本身就是辩证法所揭示的质量互变规律的胜利。而门捷列夫所预言的三种新元素的发现，则进一步说明了在化学中运用质量互变规律的重要性。他分析了有机化学中几个同系列的量转化为质，并且指出，“在化学中，差不多在任何地方，例如在氮的各种氧化物中，在磷或硫的各种含氧酸中，都可以看到‘量转变为质’”。恩格斯强调指出，正是马克思，把“量转变为质”了解为“化学的……主要成就”①。正由于化学中全面渗透着辩证法的质量互变规律，因而恩格斯指出，“黑格尔所发现的自然规律，是在化学领域中取得了最伟大的胜利。化学可以称为研究物体由于量的构成的变化而发生的质变的科学”②。

又例如，恩格斯在驳斥休谟、康德等人的不可知论时，运用了有机化学的成就，令人信服地论证了世界的可知性。恩格斯说：“对这些以及其他一切哲学上的怪论的最令人信服的驳斥是实践，即实验和工业。既然我们自己能够制造出某一自然过程，使它按照它的条件产生出来，并使它为我们的目的服务，从而证明我们对这一过程的理解是正确的，那末康德的不可捉摸的‘自在之物’就完结了。动植物体内所产生的化学物质，在有机化学把它们一一制造出来以前，一直是这种‘自在之物’，当有机化学开始把它们制造出来时，‘自在之物’就变成为我之物了，例如茜草的色素——茜素，我们已经不再从田地里的茜草根中取得，而是用便宜得多、简单得多的方法从煤焦油里提炼出来了”③。这表明，化学对马克思主义批判各种错误观点，确立辩证唯物主义认识论具有十分重要的作用。

现代化学的成就进一步丰富了马克思主义自然观

生命的本质是什么？是神创的，还是自然界自身演变的结果？如果是后者，那么，演变的机制又是怎样的？早在一百年前，恩格斯就批判了神创论，总结了当时有机化学和生物学的成就提出，**“生命是蛋白体的存在方式**，这种存在方式本质上就在于这些蛋白体的化学组成部分的不断的自我更新”④。恩格斯又说，“如果化学有一天能够用人工方法制造蛋白质，那末这样的蛋白质就一定会显示出生命现象，即使这种生命现象可能还很微弱”⑤。现代化学中化学自催化等理论表明，正是在核酸、蛋白质等生物大分子的自催化和催化反应上，实现着由化学系统向生命系统的转化。也正是这些生物大分子内部出现某种自我复制、自我更新，从而导致生物个体的新陈代谢、遗传、变异等一

---

① 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，126页。
② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，49页。
③ 恩格斯：《路德维希·费尔巴哈和德国古典哲学的终结》，《马克思恩格斯选集》第四卷，221—222页。
④ 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，78页。
⑤ 同④，80页。

系列现象。而生物化学和分子生物学的发展，现代化学家们已经能够用化学手段人工地制造出有生命活性的蛋白质和核酸了。这再一次表明，化学为辩证唯物主义生命观的确立和发展作出了重要贡献。

关于生命起源问题，恩格斯说，“生命的起源必然是通过化学的途径实现的。”①随着化学实践和理论的发展，对化学进化机制的深入研究，关于生命起源的化学途径的探索已有了新的前景，并日益证实着恩格斯的预见。

1953年，美国化学家米勒设计了一个模拟在原始还原性大气条件下氨基酸产生的可能过程的实验，验证了在一定条件下，由简单的无机分子可以构成生命基础的蛋白质成分氨基酸。后来又有人通过模拟方法合成生物大分子，接着人工合成蛋白质和核酸获得成功，有力地证明了在原始地球条件下，蛋白质和核酸等生物大分子有可能通过化学途径而自然发生。于是，神创论扫地殆尽，辩证唯物主义生命观已建立在牢固的自然科学基础之上了。

在辩证唯物主义宇宙观的形成和发展中，化学同样起着重要的作用。在恩格斯时代，人们认识到，宇宙由原始星云逐渐冷却，慢慢形成星体。那么，原始星云是什么物质呢？星体的演化历程又是怎样的呢？经过宇宙化学、元素演化学（其中包括许多化学问题）的研究，人们对这些问题认识得日益清楚了。原始星云最初物质是氢气云，以后才逐渐演化生成其它元素。不久前，澳大利亚化学家合成了一种新化合物一氧化三碳（C_3O），这种化合物存在的时间仅一秒钟，随即分解了，而太阳系内并不存在这种分子。它只存在于宇宙太空中。科学家们认为，这种新发现的分子可能在宇宙形成过程中起过重大作用，并为今后研究空间生命起源提供新线索。化学家在研究宇宙演变的机制方面将是大有可为的。

近几十年来，在原子-分子层次上对各种粒子，其中包括离子、自由基、配位粒子、胶粒、高聚物和生物大分子等的深入研究，大大丰富了人们对物质形态的多样性及它们的运动变化规律的认识。而从化学元素周期律到新近关于核素周期系理论的发展，揭示了物质形态的多样性与物质世界统一性的辩证统一。现代化学和现代物理学密切结合和协作，在揭示物质结构更深层次的奥秘，认识物质结构形态的多样性和物质世界的统一性方面正在日益深入，从而大大丰富辩证唯物主义物质观的内容。

化学，从根本上说，乃是人类认识物质和变革物质的一个科学领域。全部化学史就是发现新物质和创造新物质的活生生的历史。它洋溢着人类的创造精神，研究这部生动的历史，对于研究认识论、探讨认识规律有重要价值。苏联学者凯德洛夫通过化学史和化学中的一些重要发现探讨科学认识论和科学方法论，提出了许多新见解。他在《化学元素概念的演变》一书中，根据马克思主义哲学观点，从科学史、认识论和辩证逻辑角度总结化学元素概念发展的规律和特点，揭示化学元素概念内涵和外延的矛盾及其产生根源，从中总结出认识论的结论。他在《科学发现的显微剖析》一书中，通过考察门捷列夫化学元素周期律的发现过程，揭示了科学发现的某些规律性，从而有助于加深人们对创造性思维本质的认识。1969年，他出版了以《原子论的三个观点》为题的三卷书，第一卷为“吉布斯佯谬”（逻辑方面），第二卷为“道尔顿学说”（历史方面），第

---

① 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，70页。

三卷为“门捷列夫定律”（逻辑-历史方面），都是从化学史出发进行认识论和方法论探讨。由此可见，化学为充实、深化辩证唯物主义认识论和方法论提供丰富的研究素材。化学是一个蕴藏量极大的富矿，它在为人类提供物质财富的同时，也为人类提供无限多样的丰富的精神食粮。

总之，化学作为自然科学的基础学科之一，曾经促进了哲学的产生和发展，而今也在为辩证唯物主义的新发展作出自己的积极贡献。

金 吾 伦

（四）化学运动的基本矛盾

关于化学运动的基本矛盾是化学哲学中的一个基本问题。多年来学术界有不少论文对这个问题进行了讨论。总的来看主要有两种不同的观点：一种观点以恩格斯在《自然辩证法》一书中关于吸引和排斥的论述及现代化学为依据，论证化学的基本矛盾是化学的吸引作用和排斥作用；另一种观点则认为分解与化合是化学运动的基本矛盾，主要以列宁在《谈谈辩证法问题》一文中有关的一段论述及毛泽东在《矛盾论》中对这段话的引用和见解为理论依据，结合现代化学新的发展进行论证。

本着百家争鸣的精神，下面把这两种不同见解分为两节阐述，以便于促进学术研究。

1. 化学的吸引作用与排斥作用

什么是化学运动的基本矛盾，这是化学哲学研究的重要课题。多年来，学术界曾有不少同志认为，分解和化合的矛盾是化学运动的基本矛盾。我们认为，化学运动的基本矛盾不是分解和化合的矛盾，而是化学的吸引作用和排斥作用的矛盾。所谓化学的吸引作用和排斥作用，主要就是分子或晶体内各原子（或离子、原子团等）之间的电磁吸引作用和排斥作用。为了阐明这个观点，需要说明下列问题：化合和分解，化学的吸引和排斥这两对概念的含义，这两对矛盾的性质、相互关系以及它们在化学运动中的地位和作用。

怎样正确理解一种物质运动形式的基本矛盾？

正确地回答这个问题，是正确认识化学运动基本矛盾的前提。按照唯物辩证法，任何事物内部的矛盾是事物“自己运动”的动力、源泉，是事物变化发展的原因。“无论什么事物的运动都采取两种状态，相对地静止的状态和显著地变动的状态。两种状态的运动都是由事物内部包含的两个矛盾着的因素互相斗争所引起的。”① 因此，事物以某种形式运动的动力应是贯穿于这种运动形式的相对静止和显著变动（即量变和质变）两种运动状态之中的矛盾。但是，在任何一种物质运动形式内部，都包含许多矛盾，形成矛盾群。贯穿于其量变和质变全过程中的矛盾也往往不止一对。在这些矛盾中，什么是

① 《毛泽东选集》（合订本），人民出版社1968年版，306—307页。

基本矛盾，什么是非基本矛盾，应该怎样区分呢？关于这个问题，我们可以从马克思主义经典作家对社会基本矛盾的分析中得到启示。

恩格斯和列宁都曾指出：生产的社会性和占有的私人性之间的矛盾是资本主义社会的基本矛盾①。可见他们都把生产力和生产关系的矛盾看作社会的基本矛盾。马克思主义经典作家论述社会基本矛盾时，总是与社会历史的基础、社会发展的根本动力等科学概念紧密地联系在一起的。例如，马克思、恩格斯指出，唯物史观把与“生产方式相联系的、它所产生的交往形式，即各个不同阶段上的市民社会，理解为整个历史的基础”②。马克思曾深刻地阐明：生产力和生产关系的矛盾是社会发展最根本的动力③。同样，斯大林曾写道：“在社会物质生活条件体系中，究竟什么是决定社会面貌、决定社会制度性质、决定社会从这一制度发展到另一制度的主要力量呢？历史唯物主义认为，这种力量就是人们生存所必需的生活资料的谋得方式，就是……物质资料的生产方式。”④不言而喻，这里所说的生产方式，是生产力和生产关系的统一。由此可见，社会的基本矛盾是与社会历史的基础密切联系着的，它是社会“自己运动”的根本动力，是对社会发展起根本的决定作用的矛盾。

从以上经典作家的论述中，我们体会到，某一事物或某种物质运动形式的基本矛盾具有下列基本特征：第一，它是决定事物本质的矛盾，是过程中其它矛盾的基础，其它矛盾是由它派生和决定的；第二，它是事物运动发展的根本动力，是归根到底对事物的运动发展起决定作用的矛盾；第三，它是贯穿于事物发展全过程中的矛盾，即贯穿于事物的相对静止和显著变动两种运动状态之中的矛盾，它不仅决定事物的量变过程，而且决定其质变过程，决定其从量变到质变和从质变到量变的转化。

化学运动的基本矛盾也应是这样的矛盾。物质的化学运动也包含相对静止和显著变动两种运动状态，简称化学静态和化学动态。化学动态就是化学反应，其主要内容是某些原有化学键的破坏和新化学键的建立，反应物分子（或晶体）转化为生成物分子（或晶体）。化学静态就是未发生化学反应或反应已达化学平衡的状态。对化学静态的研究主要是对物质的化学结构和物理性质的研究。化学静态和化学动态是互相密切联系的。处于化学静态的物质只有在其量变达到一定程度时，才会引起质变，发生化学反应。所以，化学运动的基本矛盾应是这样的矛盾：它决定整个化学运动的本质，是化学运动中其它各种矛盾的基础；它贯穿于任一化学运动的全过程，即贯穿于其化学静态和化学动态这两种化学运动状态之中；它是物质发生化学运动的根本动因和最后的决定力量，不仅决定物质的化学结构和物理性质，而且决定物质的化学反应，决定结构和反应的相互联系。因此，要确定什么矛盾是化学运动的基本矛盾，必须对化学结构中的矛盾和化学反应中的矛盾作统一的考察和综合的研究。

分解和化合矛盾的性质及其在化学运动中的地位

研究化学运动的基本矛盾，当然应从分析化学运动中的诸矛盾及其相互关系入手。

---

① 《马克思恩格斯选集》第3卷，442页；《列宁全集》第2卷，133页。
② 《马克思恩格斯全集》第3卷，人民出版社，1960年，42—43页。
③ 《马克思恩格斯选集》第2卷，人民出版社，1972年，82—83页。
④ 斯大林：《辩证唯物主义与历史唯物主义》。

化学运动中包含着许多对矛盾，这里只讨论其中两对重要的矛盾：分解和化合，及化学的吸引作用和排斥作用。

多年来我国学术界有一种意见认为，分解和化合是化学运动中一对重要的矛盾。有些同志甚至认为它是化学运动的基本矛盾，并以下面的论述为依据，即列宁所说“在化学中，原子的化合和分解”[①]和毛泽东同志在《矛盾论》中所说“化学中的化分和化合”[②]。这里所说的分解是指分子（或晶体）分解为原子、离子、自由基或原子团等，化合是指原子、离子、自由基或原子团等结合为分子（或晶体），与分解反应（一个较大的分子变为若干个较小的分子的化学反应）和化合反应（若干个较小的分子变为一个较大的分子的化学反应）含义不同。但是，恩格斯在《自然辩证法》中指出，“在大多数场合下，化合时产生运动，分解时必须供给运动”[③]，显然是指化合反应和分解反应，而不是指化合和分解。任何化学反应都包含分解和化合这两个方面，分解中必有某些原有化学键破坏，化合中必有某些新化学键建立，二者性质相反，又存在于一个统一的化学反应过程中，所以构成一对矛盾。其矛盾性的表现之一是能量效应：分解时体系必须吸收能量，化合时体系一定释放出能量，二者相反，而整个反应的能量效应则由两者的差值决定。所以分解和化合是任何化学反应都具有的两个方面，这一对矛盾确实是各种化学反应中普遍存在的一对重要的矛盾。

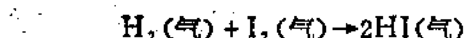
有的同志提出分解和化合是化学运动的基本矛盾，主要论据之一是引用恩格斯、列宁和毛泽东同志的有关论述。但所作的论证未必符合经典作家的原意，因为所引用经典作家关于分解（化分）和化合的论述中都未涉及化学运动基本矛盾问题。例如，恩格斯在《反杜林论》 和《自然辩证法》中讲到分解和化合时就是如此。何况如前所述，他所说的是分解反应和化合反应，与这里说的分解和化合无关。列宁在《谈谈辩证法问题》一文中说明矛盾的普遍性时写道：“在数学中，正和负，微分和积分。在力学中，作用和反作用。在物理学中，阳电和阴电。在化学中，原子的化合和分解。在社会科学中，阶级斗争。”在这里，也并未讨论各种运动形式的基本矛盾问题。例如，众所周知，阶级斗争就不是社会的基本矛盾。可见，列宁的这一论述丝毫没有“原子的化合和分解是化学运动基本矛盾”的意思。

要断定分解和化合是不是化学运动的基本矛盾，只能根据这对矛盾的性质及其在化学运动中的地位和作用来分析，看它是否具有前述化学运动基本矛盾应具有的那些特征。根据对具体化学运动的分析，可以看出，分解和化合这对矛盾具有以下几个明显的性质：

第一，分解和化合不是贯穿于化学运动全过程的矛盾。首先，它只在化学运动的质变阶段即化学反应中才出现，而在化学运动的量变阶段，在物质的化学结构中，它并不存在。其次，即使在化学反应中，分解和化合也不一定是贯穿于反应之始终的矛盾。对于有些反应，它是贯穿于反应全过程的，而对于另一些反应则不然。许多化学反应是分步进行的。例如，高温下氢气和碘蒸气合成碘化氢的反应

---

① 《列宁选集》第二卷，人民出版社，1972年，711页。
② 《毛泽东选集》（合订本），284页。
③ 《自然辩证法》，人民出版社，1971年，60—61页。
④ 《反杜林论》，人民出版社，1970年，56页。



$$H_2(气)+I_2(气)\rightarrow 2HI(气)$$

反应机理分二步：第一步，I_2分子分解为I原子（自由基）；第二步，二个I原子与一个H_2分子反应生成二个HI分子，即

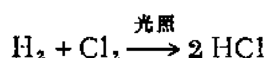


$$I_2(气)+M\rightleftharpoons 2I\cdot+M \qquad (1)$$



$$H_2+2I\cdot\longrightarrow 2HI \qquad (2)$$

在基元步骤（2）中，H_2分子的分解和H原子、I原子的化合同时发生；但在基元步骤（1）中，只发生分解而未发生化合。再如，在日光照射下氢气和氯气合成氯化氢的反应



$$H_2+Cl_2\xrightarrow{光照}2\,HCl$$

这是一个链反应，其反应机理可表示为：



$$Cl_2\xrightarrow{光子}Cl\cdot+Cl\cdot \qquad (1) \qquad (链的引发)$$



$$Cl\cdot+H_2\longrightarrow HCl+H\cdot \qquad (2)$$



$$H\cdot+Cl_2\longrightarrow HCl+Cl\cdot \qquad (3) \qquad (链的传递)$$

……



$$M+Cl\cdot+Cl\cdot\longrightarrow M+Cl_2 \qquad (4) \qquad (链的中断)$$

在链的引发基元步骤中只发生分解而无化合；在链的中断基元步骤中只发生化合而无分解；只有在链的传递各基元步骤中才是边分边合，分解和化合同时发生。可见，在化学反应中分解和化合不一定每一步都同时发生，分解和化合的矛盾不一定贯穿于化学反应之始终。

第二，在一个化学反应中，从物质的转化来看，分解和化合是发展方向一致的"并立性的矛盾"，而不是"背反性的矛盾"，不是同一事物的肯定和否定的矛盾。所谓"背反性矛盾"是以两极对立为基础的矛盾，矛盾双方的性质正相反对，表现为正面与反面，肯定与否定的对立。矛盾双方在总体发展中的作用是相反的，矛盾双方斗争的结果是一方克服另一方。所谓并立性矛盾是以整体中的差异为基础的矛盾，矛盾双方的性质是相异的而非正相反对的，双方属于整体中的不同部分或不同侧面。矛盾双方在总体发展中方向一致，都起积极的作用，双方互相帮助，互相促进。但双方由于进入了同一个全局的范围，或由于在某些焦点上发生了不一致或相反相成的关系，因而成为现实的具体的矛盾。显然，这种性质的矛盾不是事物整体运动发展的根本动力。为什么分解和化合在一个具体的化学反应中构成并立性矛盾而非背反性矛盾呢？这是由于我们所考察的是一个具体化学反应中的分解和化合两个侧面的关系，不是正反应中的分解和逆反应中的化合（或正反应中的化合和逆反应中的分解）的关系；由于被分解的是反应物，而化合成的是产生物，二者不是同一物；分解中破坏的是反应物中某些原有的化学键，化合中建立的是产生物中新的化学键，二者不是同一化学键。所以在具体化学反应中，分解和化合并不正相反对。例如在合成碘化氢反应中，被分解的是I_2和H_2分子，它们中的键被破坏，化合成的是HI分子，建立的是HI中的键。所以分解和化合直接或间接地同样起着否定反应物和肯定产生物的作用，对于化学反应中的物质转化来说它们的总体发展方向是一致的。但是它们双方既然是同一反应过程的两个侧面，相互间就有联系，在能量效应和反应的"中间产物"这两个焦点上发生了相反和不一致的关系。化合时放出

能量，分解时吸收能量，二者相反。分解时产生作为“中间产物”的原子，化合时消耗掉这些“中间产物”，二者相异。所以它们构成了现实的具体的矛盾。不过，这些相反、相异，正是化学反应中实现物质转化所需要的。在同一反应中，分解所需要的能量部分或全部由化合时放出的能量供给；化合需要的“原料”（“中间产物”原子）完全由分解供给。双方互相帮助，相反相成。由此可见，分解和化合不是同一事物的肯定与否定的矛盾，不是存在与非存在的同一，而是发展方向一致的并立性矛盾。这种性质的矛盾不是物质化学运动的根本动力。

第三，从分解和化合与化学的吸引作用和排斥作用两对矛盾的关系来分析，可以看出，无论是分解或是化合，都是在化学的吸引作用和排斥作用这一对矛盾的基础上发生的。这一点将在后面详细讨论。

综上所说，我们认为，分解和化合这一对概念，只概括了化学反应的不甚深刻的本质，只说明了化学反应的结果，而没有揭示出化学反应的更深刻的本质和化学运动的原因。分解和化合的矛盾不仅与物质的化学结构无关，也不能决定化学反应的性质。它不是化学运动中其它各种矛盾的基础，不是物质发生化学运动的根本动力。因此，这对矛盾不是化学运动的基本矛盾，而是化学运动的一种非基本矛盾。

怎样正确理解“化学的吸引和排斥”

恩格斯在《自然辩证法》中对辩证法的一般问题，作了具有纲领性意义的表述。他指出：“所谓客观辩证法是支配着整个自然界的，而所谓主观辩证法，即辩证的思维，不过是自然界中到处盛行的对立中的运动的反映而已，这些对立，以其不断的斗争和最后的互相转变或向更高形式的转变，来决定自然界的生活。”①接着，他根据当时科学发展的水平用无机界、有机生命和人类历史中的事实进一步说明“对立中的运动”在客观世界中是“到处盛行的”，阐发了矛盾的普遍性和特殊性。关于无机界，恩格斯主要讲了吸引和排斥，他指出：“吸引和排斥。在磁那里开始了两极性，它在那里是在同一物体中显现出来的；在电那里，它就把自己分配到两个或两个以上带有相反的电荷的物体上。一切化学过程都归结为化学的吸引和排斥的过程。”②关于化学过程的这一著名论断，直到现在对于我们研究化学运动的矛盾仍有重大指导意义。不过，恩格斯的以上论述是在1880年前后写的，当时电子和原子结构尚未发现，现代结构化学理论更远未形成，所以今天应用这一著名论断，就有一个怎样正确地应用的问题。我们认为，要正确地理解“化学的吸引和排斥”，应力求做到以下三点：第一，应弄清楚在恩格斯的著述中吸引和排斥这一对概念的含义；第二，应了解在恩格斯的时代化学界对化学的吸引和排斥的认识；第三，最重要的，我们应根据现代物理学和化学的成就来理解和应用这一对概念。

根据恩格斯关于吸引和排斥的一系列论述，可以看出，他在使用这一对概念时，有两种不同的含义。

恩格斯在论文《运动的基本形式》中指出：非生物界“一切运动的基本形式都是接近和分离、收缩和膨胀，——一句话，是吸引和排斥这一古老的两极对立。”又指出：

①、② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，189页。

“吸引和排斥在这里不是被看做所谓‘力’，而是被看做运动的简单形式。”[1]可见，吸引和排斥的第一种含义是指两类性质相反的运动形式。吸引是指两个或多个物体相互接近的运动形式，如接近、收缩、凝聚、结晶、吸收、化合等运动形式，排斥是指两个或多个物体相互分离的运动形式，如分离、膨胀、熔融、溶解、辐射、分解等运动形式。可分别把它们统称为吸引运动和排斥运动。

吸引和排斥的第二种含义是指物体与物体之间的吸引作用和排斥作用。吸引作用包含各种吸引力；排斥作用包含各种排斥力和物体由于固有的运动而具有的排斥作用。恩格斯也常常在这种含义上使用吸引和排斥这一对概念。例如，恩格斯在分析太阳系的起源时指出：“任何太阳系的生存过程，都表现为吸引和排斥的相互作用”[2]。这里说的吸引是指“重量，即行星和中心天体之间的吸引”，排斥是指气体质点固有的运动所产生的排斥。所以它们是指吸引作用和排斥作用，而不是指吸引运动和排斥运动。又如，恩格斯在分析物质的属性和批判“重力论”时所说的吸引和排斥[3]，以及他在论述辩证法一般问题时（即在前面引用的那段札记中）所说磁和电的吸引和排斥，显然都是指吸引作用和排斥作用。再如，他在论述一个天体上物体的运动时，直接使用了“排斥作用”一词，提到“把具有排斥作用的机械运动简单地由物体传递给物体。”[4]

吸引作用、排斥作用与吸引运动、排斥运动相互间有着密切的联系。恩格斯曾深刻地指出：非生物界的“一切运动都存在于吸引和排斥的相互作用中。”[5]他又曾指出：“自然界中物体——不论是死的物体或活的物体——的相互作用中既包含和谐，也包含冲突，既包含斗争，也包含合作。”[6]这就是说，相互作用是对立统一关系。因此，不论是吸引运动或是排斥运动，都存在于吸引作用和排斥作用的对立统一之中。吸引作用和排斥作用的矛盾是吸引运动的动力，也是排斥运动的动力。具体地说，一般情况下，当两个物体相互间的吸引作用胜过排斥作用时，它们就可能发生相互接近的吸引运动。反之，如排斥作用胜过吸引作用，则它们就可能发生相互分离的排斥运动。而当吸引作用与排斥作用势均力敌时，它们即处于暂时的相对的平衡状态。不论这两个物体相互间正在发生吸引运动，或正在发生排斥运动，或正处于平衡状态，吸引作用和排斥作用这一对矛盾的两个方面都是同时存在着的。

既然在恩格斯的著述中对吸引和排斥这一对概念有两种含义，那末，恩格斯所说的“化学的吸引和排斥”当然可以作两种理解：第一，是指化学的吸引运动和排斥运动；第二，是指化学的吸引作用和排斥作用。化学的吸引运动、排斥运动与化学的吸引作用、排斥作用同样是有密切联系的。当分子（或晶体，下同）内原子（或离子等，下同）之间的化学的吸引作用和排斥作用大体势均力敌时，分子处于稳定状态。当分子从外界吸收能量，使其内部的原子之间的化学排斥作用增大到胜过化学吸引作用时，将发生化学排斥运动，原子之间的化学键将被削弱，甚至破坏。反之，当未构成化学键的原子之间的化学吸引作用胜过化学排斥作用时，将发生化学吸引运动，原子相互接近，直

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，55页。
② 同①，57页。
③ 同①，221—222页。
④ 同①，225页。
⑤ 同①，55页。
⑥ 《马克思恩格斯全集》第34卷，人民出版社，1972年，161页。

到建立化学键，结合成新的分子，同时放出能量。由此可见，可以认为，化学的排斥运动就是分解，化学的吸引运动就是化合，而分解和化合都是在化学的吸引作用和排斥作用对立统一的基础上发生的。化学的吸引作用和排斥作用的矛盾既是发生分解过程的动力，也是发生化合过程的动力。

我们体会，恩格斯关于一切化学过程都归结为化学的吸引和排斥的过程的论断，是他应用唯物辩证法，对化学思想的长期发展进行总结的结果。为什么在一定条件下有些物质相互间容易发生化学反应，而另一些物质则很难起反应？是什么力量使原子结合在一起？发生化学反应的原因究竟是什么？这些是人们长期探索的古老的问题。在古希腊，恩培多克勒最早用“爱与憎”解释元素的结合和分解。直到十九世纪八十年代初，自然科学本身还没有完全弄清楚关于化学的吸引和排斥的本质，关于化学运动的原因，还有待于以后科学的发展来解决。恩格斯就指出过当时科学界这种思想混乱的情况。例如，他指出：“赫尔姆霍茨坚持说，在化学中和在力学中一样，力只存在于吸引之中，因而是和其他物理学家叫作能并和排斥同一的东西正好相反的东西。”① 但是，尽管如此，当时恩格斯已深刻地指出：“根据辩证法本身就可以预言：真正的物质理论必须给予排斥以和吸引同样重要的地位；只以吸引为基础的物质理论是错误的，不充分的，片面的。”② 并作出了“一切化学过程都归结为化学的吸引和排斥的过程”的论断。近一百年来科学的发展，证实了恩格斯的这些预言和论断。

十九世纪末和二十世纪初，在化学的密切配合下，现代自然科学的发展使人们认识到有四种物理的吸引和排斥作用，即引力作用、电磁作用、强相互作用和弱相互作用。化学的吸引作用和排斥作用主要是在分子和晶体内部各原子（或离子、原子团等）之间的电磁吸引作用和排斥作用。它们主要表现为各种化学键，也表现为不相邻原子（或离子）之间较弱的相互作用。对于离子键、共价键、金属键等不同类型的化学键，吸引作用和排斥作用的具体形式和性质是不同的。但它们的本质都是电磁作用，包括这一原子的原子核与另一原子的电子之间的吸引作用，各个原子的原子核与原子核之间的排斥作用，电子与电子之间的排斥作用（包括库仑排斥作用及由于泡利不相容原理的排斥作用等）。此外，还有由于电子的绕核运动、分子和晶体内原子或离子的振动而具有的排斥作用，它们都与粒子间的电磁作用有关。

化学的吸引作用与排斥作用的矛盾是化学运动的基本矛盾

化学吸引作用与排斥作用的矛盾既与物质的化学反应有关，又与物质的化学结构有关。我们先讨论它与化学结构的关系。

许多无机化合物是离子化合物，其组成元素的电负性相差较大，所以形成了正、负离子，构成离子键。正负离子以库仑引力互相吸引，吸引势能与离子中心间距离R成反比。但正负离子的电子云之间有排斥作用，这种排斥作用在离子距离远时可忽略不计，但在距离很近时不能忽略。可以认为，这种近程排斥作用与R的m次方成反比，m为远大于1的整数（例如，对于NaCl，m＝8）。因此，如正负离子电价数的绝对值分别

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，61页。

② 同上，221—222页。

为w_+和w_-，一对正负离子吸引作用和排斥作用的总势能为$V=-\frac{w_+w_-e^2}{R}+\frac{B}{R^m}$，B为比例常数。当正负离子间的库仑吸引作用和近程排斥作用互相平衡时，R等于平衡距离R_0，如无外界影响，正负离子将围绕距离R_0不断振动，形成稳定的离子键，这时势能达最低点。从V对于R的微商等于零可得$R_0{}^{m-1}$与w_+w_-成反比，这意味着正负离子的电价越高，平衡距离越小。离子化合物通常以大量正负离子构成的离子晶体的状态存在，晶体中正负离子相间排列。例如，在氯化钠晶体中，每个氯离子与6个钠离子相邻接，每个钠离子与6个氯离子相邻接，构成立方晶胞。因此，在氯化钠晶体中，对于每个离子，在与它的距离为R_0处有6个异号离子，在距离为$\sqrt{2}R_0$处有12个同号离子，在距离为$\sqrt{3}R_0$处又有8个异号离子，在距离为$2R_0$处又有6个同号离子等等。这个中心离子与所有这些异号离子之间有库仑吸引作用，与所有这些同号离子之间有库仑排斥作用，此外它与最邻近的6个异号离子之间还有近程排斥作用。离子晶体的晶格能就是一摩尔晶体中所有离子相互间的吸引和排斥作用产生的总势能的绝对值。由此可见，离子键是离子相互间的电磁吸引作用和排斥作用的对立统一。离子晶体的晶格能及和它有关的各种性质（如熔点、硬度等）都决定于离子间吸引和排斥的矛盾。

离子晶体的结构型式，即晶体中各正负离子在空间的分布方式，是多种多样的。一种离子化合物的晶体采取哪一种晶体结构型式，决定于其正负离子的半径比、数量比以及离子的极化性能等因素，其中离子半径是一个重要因素。正离子半径r_+与负离子半径r_-之和应等于离子键长R_0。但怎样将R_0划分为r_+和r_-呢？鲍林认为：（1）各种同电子构型的离子（例如F^-、Na^+等）的半径与作用于离子最外层电子上的有效核电荷成反比；（2）可模仿$R_0{}^{m-1}$与w^2（当$w_+=w_-$时）成反比的关系，假定r^{m-1}也与w^2成反比。由此他确定了一整套离子半径的数值。可见，离子半径的大小是由离子相互间的吸引排斥矛盾和各离子内部的吸引排斥矛盾综合地决定的。在离子晶体中，一般负离子比正离子大，因此负离子在占据空间上起主要作用。根据离子键以库仑力为主要基础，无方向性、饱和性的特点，在离子晶体中，具有一定半径的正离子在保持与负离子接触的条件下，将与尽可能多的负离子接触，以降低总势能。所以，对于二元离子晶体可以认为负离子作等径圆球密堆积或次密堆积，而正离子以一定比例填入负离子堆积所形成的空隙中，形成正负离子相间排列的结构。这样从总体上提高了空间占有率，使晶体的能量降至最低的水平，也就是离子间的吸引作用和排斥作用最接近平衡。这些配位于一个正离子周围的几个负离子，一般构成配位多面体。根据上述原则，r_+越大正离子配位数CN_+越高，r_-越大则CN_+越低，离子半径比$\frac{r_+}{r_-}$的大小决定CN_+的高低和配位多面体的形式。鲍林根据实验结果总结出关于离子晶体结构的几个规则，上述结晶化学原则就是鲍林第一规则的内容。从以上的分析可以看出，这一规则的基础是离子间吸引和排斥的对立统一。其它几个鲍林规则也是如此。在离子晶体中，正负离子能互相极化。当一个正离子使一个负离子极化时，产生诱导偶极。离子使其它离子极化的能力的大小和被其它离子极化的难易，显然都要由离子内部吸引与排斥的矛盾和离子间吸引与排斥的矛盾综合地决定。离子极化对化合物的结构有重要影响，它使键能、晶格能增大，使键长缩短。如果离子极化强烈，将导致从离子键向共价键过渡的键型变异并改变晶体结构型式。综合以上各方面可以得出结论：离子晶体的结构型式，由离子相互间的吸引排斥矛

盾和离子内部的吸引排斥矛盾综合地决定，而前一矛盾是主要的。在原子晶体、金属晶体、分子晶体和过渡型晶体中，虽然粒子间的相互作用不是离子键，不同于离子晶体，但原子、离子、分子在空间的分布方式，即晶体结构型式，同样主要是由这些粒子间的吸引作用与排斥作用的矛盾所决定的。

在许多单质和大量化合物的分子和晶体中，化学键不是离子键，而是共价键。路易斯于1916年提出共价键的电子理论，对结构化学理论的发展产生了深远的影响。但是，关于共价键的本质问题仍长期未能解决。1925—1926年量子力学的建立，使人们开始认识微观客体的运动规律，为解决共价键的本质问题提供了必要的条件。1926年，薛定谔建立了微观客体的波动方程——薛定谔方程，确立了量子力学的数学方法，从此人们就以求解薛定谔方程的方法，来研究原子和分子中电子与核的运动状态。1927年，海特勒和伦敦将量子力学用于氢分子，得到氢分子的两个状态（分别用Ψ_S和Ψ_A表示）的能量（E_S和E_A）随核间距R变化的曲线及电子等密度面图。因$E_S<E_A$，所以Ψ_S是基态，Ψ_A是激发态。在基态的电子等密度面图中，在两核间密度较大，这表明在两核间有较为密集的电子云，它对于两核有强的吸引作用。从基态的能量曲线可以看出，当两核逐渐接近时，E 逐渐降低（由于电子和两核的吸引作用超过两核之间的排斥作用），但当R过小时，E 又迅速升高（由于核间斥力当R小时迅速增大），中间有一个能量最低点。这些都说明在基态氢分子能稳定存在。在状态Ψ_A的电子等密度面图中，在两核间密度为零。E_A能量曲线不仅比E_S高，而且没有最低点。这些都说明在状态Ψ_A氢分子不能稳定存在，Ψ_A称为推斥态。海特勒和伦敦计算得到的氢分子的结合能，达到结合能实验值的66.148%，平衡距离为0.869Å，也接近实验值0.741Å，这是了不起的成就。以后有不少人对他们的计算方法加以改进，所得结果与实验值越来越吻合。此外，从光谱分析得知，在氢分子的基态一对电子是自旋反平行的，而在推斥态，它们是自旋平行的。以上工作阐明了氢分子中共价键的本质：当两个氢原子相互接近时，原子轨道要发生一系列的变化（相互干涉、收缩、极化等），导致两核间吸引因素的逐渐增长，结果电子密度的分布是使两核间有较为密集的电子云，它对两核有强烈的吸引作用，克服两核间的库仑排斥作用，吸引作用占优势使体系的能量降低，形成稳定的共价键。

根据薛定谔方程所代表的物理意义的分析，可以认为，共价化合物和单质分子中的基本矛盾是在其中起重要作用的吸引因素和排斥因素的矛盾，这对矛盾又受到微观客体运动中波动性与微粒性矛盾的影响。其中主要的吸引因素是原子核对电子的库仑吸引作用。排斥因素包括：（1）核与核之间及电子与电子之间的库仑排斥作用；（2）泡利排斥作用；（3）由于电子绕核运动的动能产生的离心倾向，即电子云向外扩张的倾向，有的学者把这种倾向称为“动能压力”。量子力学计算库仑作用势能的方法与经典物理学的方法基本相同，但由于微观客体的波粒二象性，计算动能的方法与经典物理学不同。计算电子的动能，要用动能算符$\hat{K}$，然后计算平均动能。由此，电子平均动能的大小取决于它的波函数随位置变化曲线的斜率（$\frac{\partial\psi}{\partial x}$等）的绝对值。如果某个电子以显著几率出现的区域很小（电子云很紧缩），则其$\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|$取得较大数值的机会很多，所以这个电子的平均动能很大，电子云向外扩张的倾向很大。只有当这种扩张倾向被一种相当的吸引作用（例如原子核的吸引作用）所平衡时，电子的运动状态才能处于定态。

微观体系处于平衡时平均总动能$\overline{K}$和平均总势能$\overline{V}$的关系，可由从薛定谔方程推引出的维里定理确定。维里定理指出：当质点间只有静电吸引力和静电排斥力相互作用时，体系处于平衡状态的必要条件为$\overline{K}=-\frac{1}{2}\overline{V}$。对于原子、分子中的电子来说，只有当$\overline{K}=-\frac{1}{2}\overline{V}$时，由于电子运动动能所产生的排斥作用（动能压力）才能与电子所受原子核的库仑吸引作用相平衡。如$\overline{K}<-\frac{1}{2}\overline{V}$，这表示排斥作用过弱，净余的吸引作用要把电子吸引得更加靠近核，使$\overline{K}$增大$\overline{V}$减小；如$\overline{K}>-\frac{1}{2}\overline{V}$，这表示排斥作用过强，体系中各质点要彼此分离开来，使$\overline{K}$减小$\overline{V}$增大。到$\overline{K}=-\frac{1}{2}\overline{V}$后体系达平衡。

目前，从很多量子化学计算结果的分析中可得出下列结论：（1）能量相近并满足一定对称性条件的各原子轨道，相互交盖时能发生干涉作用。在加强性干涉作用中，电子云在两核之间的区域变得比较密集，使这个区域中波函数——位置曲线变得平坦些，这使得“动能压力”减小。（2）以上结果使$\overline{K}<-\frac{1}{2}\overline{V}$，破坏了原存在于原子体系中的平衡关系，使得原子核能把电子云吸引得更加紧靠核，这样就在两核之间的区域形成更加密集的电子云，它成为相当强大的吸引中心，克服两核间的排斥作用而在两核间形成一定强度的共价键。（3）原子轨道的变形、极化作用。在另一个原子核的吸引作用下，原子轨道要变得更加偏向于这另一个核，这也有利于电子云在二核间区域的密集，加强了吸引中心的吸引作用。（4）相关效应：由于电子间的库仑排斥作用，两电子倾向于有较大的平均距离，这降低了电子间的平均库仑排斥势能，也使得分子体系更加稳定。由此可见，量子化学它充分地证明：共价键是化学的吸引作用和排斥作用的对立统一。

金属键是第三种化学键可用以分子轨道理论为基础的能带理论来说明。金属原子的价电子离域倾向很大，一个由N个金属原子组成的金属单晶可以看作一个“大分子”，这个“大分子”中原子间的结合力是从离域的N中心键得来的，这个离域的N中心键就是金属键。显然，在离域电子与金属正离子间有库仑吸引作用；各正离子相互间有库仑排斥作用；金属中还存在由于电子的运动、正离子的振动而产生的排斥作用以及泡利排斥作用。

离子键、共价键和金属键是三种极限键型，它们是化学引斥矛盾的三种典型形式。在实际的单质和二元无机化合物晶体中，原子间结合力的性质纯粹属于这三种键型之一的只是少数，多数偏离这三种典型的键型，不同程度地处于两种或三种典型键型之间的过渡状态，发生键型变异现象。所以，其中吸引、排斥矛盾的形式是复杂多样的。络合物中的情况更较复杂。关于络合物的结构，1923至1935年间培特和冯弗莱克提出晶体场理论，其基本观点是认为络合物中心金属离子和配位体之间的相互作用，主要来源于类似离子晶体中正负离子间的那种作用；但有一个重要补充：考虑到配位体静电场不是球形对称的，而中心离子的五个d轨道的空间取向不同，所以这些d轨道的电子云所受配位体的排斥作用不完全相同，因而产生d轨道的能级分裂。1952年欧格耳认为：络合物中心金属离子和配位体之间不仅有电价键成分，而且有一定的共价键成分，即它们的轨道有一定的重叠。中心离子d轨道能级分裂的原因，是配位体场的静电作用和生成共价键分子轨道的综合结果。他把晶体场理论和分子轨道理论结合起来，建立了配位场理

论，比晶体场理论能更好地说明实验事实，取得了成功。因此，体现在离子键和共价键中的不同形式的吸引和排斥的矛盾，在络合物中都是存在的。由此可见，不论在金属和合金中或是在络合物中，化学键都是化学的吸引作用和排斥作用的对立统一，决定物质化学结构的矛盾都是化学的吸引作用和排斥作用的矛盾。这一点是和非金属单质、共价化合物及离子化合物一样的，不过对于不同的键型和晶体构型，这对矛盾的表现形式各有其特殊性。因此可以认为，化学的吸引作用和排斥作用的矛盾是决定一切物质的化学结构的基本矛盾。

以上我们详细地讨论了化学吸引作用和排斥作用的矛盾与物质化学结构的关系，以此为基础进而讨论它与化学反应的关系就很容易了。化学反应的过程可以看作破坏反应物结构和建立产生物结构的过程，其最主要的内容是旧化学键的断裂和新化学键的形成。既然一切类型的化学键实质上都是化学的吸引作用和排斥作用的对立统一，既然这对矛盾是决定一切物质的化学结构的基本矛盾，那末，旧化学键断裂旧结构破坏和新化学键建立新结构形成的过程，就一定是在这对矛盾又斗争又统一的基础上发生的了，这对矛盾就必然是物质发生化学反应的根本动力。

我们以碳酸钙受热分解反应



$$CaCO_3\text{（固）}\rightleftharpoons CaO\text{（固）}+CO_2\text{（气）}$$

为例来说明。反应产物氧化钙是由Ca^{2+}和O^{2-}组成的NaCl型（面心立方晶胞）的离子晶体；CO_2分子是直线型结构，有二个互成180°的双键，即O=C=O，C—O键长1.16Å，介于一般双键和叁键之间，表明它有一定程度的叁键特征。反应物碳酸钙是由Ca^{2+}和$[CO_3]^{2-}$组成的离子晶体；碳酸根离子为平面等边三角形离子，碳原子在中心，为三个氧原子所配位，其中三个C—O键是等价的极性共价键，C原子显然是sp^2杂化的，键长1.31Å，介于单键双键之间，键角∠O—C—O为120°，在这个分子离子上有一个不定位的大π键π_4^6。$CaCO_3$通常存在两种晶型：方解石和文石，方解石有菱面体晶胞，可看作NaCl型立方晶胞沿体对角线压缩而成，CO_3^{2-}三角形平面与三重轴垂直；文石的晶胞结构更较复杂①。以上反应物和生成物的结构表明：在反应过程中不仅从CO_3^{2-}离子中要有一个C—O键断裂，分出一个O^{2-}离子来，剩余部分的两个C—O键也要发生变化，键长变短，键角变大，从而它变为气态CO_2分子，脱离晶体。晶体本身的构型也发生了变化。Ca^{2+}离子周围的异号离子变了，正负离子在空间的分布方式也变了。总之，各原子、离子相互间的吸引、排斥矛盾全都发生了变化。

这些变化是怎样发生的呢？从各种金属的碳酸盐的热稳定性变化规律可以看出，它们的热分解反应可用离子极化的原理来说明②。碳酸钙发生热分解反应的关键是Ca^{2+}离子通过对CO_3^{2-}离子的极化，向CO_3^{2-}争夺氧原子使之成为O^{2-}离子。本来，在稳定的CO_3^{2-}离子中，在中心C原子核和任一O原子核之间的区域有比较密集的电子云，它对两核的吸引作用与两核相互间的库仑排斥作用相平衡，形成稳定的共价键。加热碳酸钙时，加剧了碳酸钙晶体中正负离子的振动，使它们有可能更加靠近。当一个Ca^{2+}离子与一个CO_3^{2-}离子很靠近时，Ca^{2+}对这个CO_3^{2-}离子的极化作用大大加强，使整个

---

① 见周公度：《无机结构化学》，科学出版社，1982年，354—355页。

② 参见尹敬执、申泮文：《基础无机化学》下册，人民教育出版社，1980年，484—487页。

CO_3^{2-}发生了电子云变形。由于CO_3^{2-}具有平面三角形结构，C原子在中心，所以Ca^{2+}与其中一个O原子特别接近。Ca^{2+}强烈地吸引这个O原子的电子云而排斥它的核，使它发生强烈的电子云变形。这样，通过与C和O原子核等的斗争，发生了下列变化：(1)CO_3^{2-}中的电子密度分布大大改变，在与Ca^{2+}最接近的这个O原子上电子云高度密集，为它变为O^{2-}离子准备了条件；(2)使这个O原子核与C核之间的区域内电子云密度显著降低，削弱了这个C—O键；(3)Ca^{2+}与这个O原子间产生较大的诱导偶极，吸引作用增强；(4)CO_3^{2-}的其余部分发生较弱的电子云变形。最后的结果是从CO_3^{2-}分出了O^{2-}离子，其剩余部分变为直线型的CO_2分子，脱离晶体，旧的离子晶体转变为O^{2-}离子与Ca^{2+}离子组成的新的离子晶体。从这个变化过程可以看出，整个碳酸钙分解反应，反应中出现的每一方面的变化，都是以化学的吸引作用和排斥作用的矛盾为基础，在各种具体的引斥矛盾的斗争和统一中发生的。化学的吸引作用和排斥作用的矛盾既决定这一反应前后各物质的化学结构，又决定这个反应本身，它是碳酸钙在一定外界条件（加热）下从化学静态发展到化学动态的根本动因和决定力量。碳酸钙分解反应也包含分解和化合两个方面，分解主要是CO_3^{2-}中一个C—O极性共价键的断裂（CO_3^{2-}分解为CO_2和O^{2-}）和相应地Ca^{2+}与CO_3^{2-}间离子键的消失；化合主要是指Ca^{2+}与O^{2-}之间离子键的形成。从前面的分析可以看出：这样的分解和化合都是在化学的吸引作用和排斥作用这对矛盾的基础上发生的。对于碳酸钙分解反应的分析，原则上也适用于其它化学反应，不过具体情况有千差万别。

总结以上所述，化学的吸引作用和排斥作用的矛盾具有以下性质：第一，它是背反性矛盾，因此有可能成为化学运动的根本动力。第二，它是化学运动中其它各种矛盾的基础。例如，化学反应的分解和化合两个矛盾方面都是在它这对矛盾的基础上发生的。第三，这对矛盾的特殊性决定了各个化学物质及其运动的个性。第四，它是贯穿于化学运动全过程（包括化学静态与化学动态）之始终的矛盾，它既决定物质的化学结构，又决定物质的化学反应。它是物质从化学静态发展到化学动态的根本动因和决定力量，是物质发生化学运动的根本动力。因此，化学的吸引作用和排斥作用的矛盾是化学运动的基本矛盾。

许　健　张星瑞

2.分解与化合

自然界的运动形式是多种多样，丰富多彩的。但就无机自然界来说，各种运动形式的最基本矛盾是吸引和排斥。不过，这种基本矛盾在不同的物质运动层次上又有其特殊的表现。化学运动是物质的基本运动形态之一，在化学运动这个层次上，它表现为分解和化合，所以化学运动的基本矛盾是分解和化合。这个问题可以从以下几个方面进行讨论。

分解和化合是化学运动的基本矛盾

化学运动中的基本矛盾是什么？这个问题的答案是在对化学运动的基本过程进行具体分析的基础上得到的。化学运动的过程虽然很复杂，但杂中有序。

首先，在通常的化学反应中（不包括核反应），我们的着眼点是讨论原子外层电子的运动。如价键理论所关心的是价电子的运动状态，若两个原子都有未成对的、自旋方向相反的电子，则可提供出来成为共用的电子对，形成共价键，将两个原子结合起来。分子轨道理论虽然考虑到了原子中所有电子参加成键的情况，但最终是成键的和反键的抵消之后，净的成键作用还是由原子最外层电子作出的贡献。分子间发生反应时，我们也主要是考虑分子中的前线分子轨道（FMO），即最高占有轨道（HOMO）和最低空轨道（LUMO）。至于离子键，则是原子的最外层电子发生了得失，形成正、负离子，靠静电作用而结合起来的。总之，在化学运动过程中，是核外电子的运动状态发生了改变，而原子的核电荷数是不发生变化的，是原子间的重新组合，所以原子是化学运动的基本物理单位，这是化学运动的一个非常重要的基本特点。因此，化学可以称为“关于原子运动的科学”①。然而，这并不意味着参加反应的具体物质一定都是一个个的原子。事实上它具有多样性，除原子外，还可以是离子、原子团、自由基、络离子、胶体粒子、小分子、大分子等。不过，它们和原子参加的化学反应一样，本质上都是为了实现原子间的重新组合，完成物质间的相互转化，都是在原子水平上进行的。

其次，从化学运动的具体过程来看，各种不同类型的化学反应，有着各种不同的反应过程，每个化学反应也都有各自的具体过程。但是，当我们从原子水平上来进行概括时，就会看到所有的化学反应，都有一个共同的特点：原子间分解和化合这一矛盾双方既相互依存，又相互斗争，并在一定条件下相互转化，实现原子间的重新组合，得到新的物质，概莫例外。由此可见，化学运动的本质是原子间分解和化合的矛盾运动。当然，对于不同的化学反应，分解和化合的具体形式，分解和化合矛盾双方转化所需要的条件，转化的快慢和转化所能达到的限度等，都是不一样的。但是，这些问题的解决，都受到分解和化合这个基本矛盾的制约，并且都是为了更好地实现这对矛盾双方的转化过程服务的，因此分解和化合的矛盾，是化学运动中的基本矛盾。

对于化学运动中的基本矛盾，革命导师运用对立统一规律，在深刻分析了化学运动的基本特点和具体过程的基础上，作过一系列的明确论述。恩格斯说：“一切化学过程都归结为化学的吸引和排斥的过程。”②又说：“化学的分解和化合”③是化学中的矛盾运动。毛泽东同志也曾引用列宁关于“在化学中，原子的化合和分解”④的论述，来说明矛盾的普遍性。还说：“化学中的化分和化合”⑤是化学科学中所具有的特殊矛盾。

化学物质是分解和化合矛盾运动的对立统一体

化学物质内部是充满矛盾的，它们在宏观上所表现出来的化学属性，就是其内部矛盾运动的反映。

根据现代物质结构的原子分子学说，一切物质都是由分子或原子组成的，分子是由

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，53页。
② 同上，189页。
③ 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，66页。
④ 《列宁全集》第38卷，人民出版社，1963年，407页。
⑤ 《毛泽东选集》（合订本），人民出版社，1966年，297页。

原子组成的。原子是化学运动的基本物理单位，因此正确分析原子间的矛盾运动，是阐明一切物质化学性质的基础。

原子由于得失电子而形成的正负离子，两者结合起来就是离子化合物。离子化合物无一例外地有其内部原子间分解和化合的矛盾运动，现用其通常的定量数学关系予以讨论，即可代表一般。

两个相距R并带有异性电荷为q_1和q_2的正负离子间，既有相互结合的化合因素

$$V_1 = -\frac{q_1 q_2}{R},$$

也有同性电荷间相互远离的分解因素

$$V_2 = Ae^{-\frac{R}{\delta}},$$

其中A和δ是常数。因此，正负离子间势能与距离R的关系可表示如下

$$V = V_1 + V_2 = -\frac{q_1 q_2}{R} + Ae^{-\frac{R}{\delta}}$$

或用R高次方的倒数$\frac{1}{R^n}$来代表其中的指数项，则上式可以改写成

$$V = -\frac{q_1 q_2}{R} + \frac{B}{R^n}$$

该式反映了两个正负离子随相互间距离R改变时，它们之间分解和化合矛盾斗争的情况。

当$R>R_0$时（R_0是正负离子间的平衡距离），上式中第一项是主要的，说明原子（或离子）间相互化合的作用是主要的，即化合是矛盾的主要方面。这时随着R向R_0靠近，即正负离子相互接近，体系的总能量降低。

当$R<R_0$时，上式中第二项是主要的，说明原子间相互远离的分解作用是主要的，即分解是矛盾的主要方面。这时随着正负离子间的进一步接近，体系的总能量升高。

当$R=R_0$时，体系的势能降低到最低点，所以有

$$\left(\frac{dV}{dR}\right)_{R=R_0} = \frac{q_1 q_2}{R_0^2} - \frac{nB}{R_0^{n+1}} = 0$$

这就十分清楚地说明，当正负离子间达到平衡距离R_0时，其内部原子间分解和化合的矛盾斗争也达到了相对平衡状态，形成了稳定的离子化合物，因此上式中原子间分解和化合的总和等于零。总和为零绝不是说原子间已经不存在分解和化合的矛盾斗争了，它所反映的真实物理图景是原子间相互化合的力量和分解的力量正好抵偿，矛盾的斗争达到相对平衡。可见，离子化合物是其内部原子间分解和化合矛盾斗争的对立统一体。

但是离子键只能在电离能很小的金属原子，和电子亲合能很大的非金属原子之间形成，因为只有这样的两种原子相互接近时，才会发生电子的转移。当两个相同的原子或性质相差不大的原子相互接近时，就不会有电子的转移，也不可能形成离子键。如非金属单质分子H_2、N_2、Cl_2等，它们是由相同原子构成的，这种情况下，我们就很难设想，在构成分子时原子间会有电子转移。事实上，这些单质不论在气态、液态或固态，都不导电，也不存在离子，它们实际上是靠共用电子对而成键的，是共价键，现在我们

以H_2为例，讨论一下共价化合物中的内部矛盾运动。

1927年，海特勒和伦敦对氢分子的薛定谔方程进行了处理，得到了H_2分子的两种近似状态Ψ_S和Ψ_A，以及相应的能量E_S和E_A，即

$$
\begin{cases}
\Psi_S = \dfrac{1}{\sqrt{2+2S}}(\Psi_1 + \Psi_2) \\
\quad = \dfrac{1}{\sqrt{2+2S}}\{\Phi_a(1)\Phi_b(2) + \Phi_a(2)\Phi_b(1)\} \\
E_S = \dfrac{H_{11}+H_{12}}{1+S}
\end{cases}
$$

和

$$
\begin{cases}
\Psi_A = \dfrac{1}{\sqrt{2-2S}}(\Psi_1 - \Psi_2) \\
\quad = \dfrac{1}{\sqrt{2-2S}}\{\Phi_a(1)\Phi_b(2) - \Phi_a(2)\Phi_b(1)\} \\
E_A = \dfrac{H_{11}-H_{12}}{1-S}
\end{cases}
$$

由于S、H_{11}和H_{12}都是核间距R的函数，因此E_S和E_A也是R的函数，故可以作出E—R图，结果得到H_2能量曲线（图1.4）。由图可见，与Ψ_A相应的能量曲线E_A没有最低点，而且比H原子状态的位能还升高了，说明Ψ_A这种状态是不稳定的，即H_2中两个H原子间的分解作用是矛盾的主要方面，因此将自动分解为两个H原子，不能形成稳定的H_2，故称Ψ_A为不稳定态。而与Ψ_S相应的能量曲线E_S中有一个最低点，这种体系的能量比原子状态的能量降低了，所以H_2分子中两个H原子间的化合作用将会增加，在能量曲线E_S的最低点上，H原子间的化合作用达到了最大，因而可以把两个H原子通过化学键结合起来，形成稳定的H_2，故称Ψ_S为基态。这就是说，H_2内部是充满着分解和化合的矛盾斗争的，而且H_2是否能稳定存在，就是由这对矛盾斗争的结果来决定的。

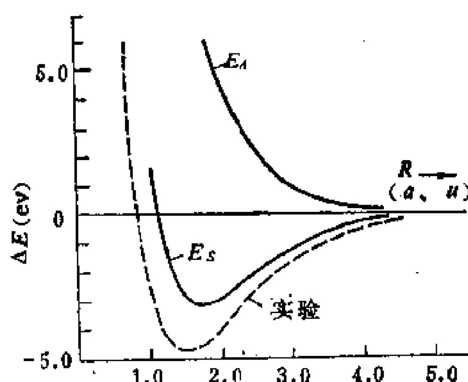


图1.4 E—R图

从H_2的能量曲线，我们还可以看到，在由两个H原子形成H_2的过程中，既有核与电子间相互接近的化合作用，又有电子间和两核间同性电荷相互远离的分解作用，即看到矛盾斗争的具体表现。当两个H原子由相距较远到相互靠近时，在$R > R_0$（两原子间的平衡距离）的情况下，即随着R向R_0接近时，两个H原子之间相互结合的化合因素和相互分离的分解因素同时增长了，但化合作用增长的更快些，成了矛盾的主要方面，而且随着R向R_0的不断接近，化合因素所起的作用越来越大。当达到$R = R_0$时，化合作用达到了最大值，分解作用也达到了足以和它抗衡的水平，使两个H原子间分解和化合的矛盾斗争达到势均力敌，保持相对平衡。这时两个H原子之间保持一定的平衡距离

（即键长），同时又以一定的作用能（即键能），把两个H原子结合起来，形成稳定的H_2。海特勒-伦敦的计算结果是：$R_0=0.87$Å，De（离解能）$=72.3$千卡/摩尔；实验结果是：$R_0=0.742$Å，$De=109.5$千卡/摩尔。当两个H原子进一步靠近，即达到$R<R_0$时，这时核间距的量度超过了限度，使处于支配地位的矛盾主要方面发生了转化，由原来的化合是矛盾的主要方面转化成分解是矛盾的主要方面了，所以事物的性质也随着发生了变化，由稳定的H_2变成了不稳定的H_2。

总之，在$R\neq R_0$时，H_2内部原子间分解和化合的矛盾斗争是不平衡的，有一方是矛盾的主要方面，并由此决定H_2的稳定性。就是在$R=R_0$时，H_2内部原子间分解和化合的矛盾斗争也仍然是客观存在的，只不过是矛盾的任何一方也压不倒另一方，双方处于相持阶段，保持均衡状态，使两个H原子在平衡距离R_0附近振动。现代科学已经证明，即使在绝对零度（何况绝对零度还达不到）的情况下，分子也还是具有一定的动能，即零点能$\hbar\omega_0/2$，其中ω_0是分子的振动频率，并以此在平衡距离R_0附近作微小振动——零振动。可见，H_2或共价化合物也是其内部原子间分解和化合矛盾斗争的对立统一体。

1937—1939年，发现量子力学中的海尔曼-费曼定理，对上述观点是一个有力的自然科学论据。因为这个定理指出，在分子中作用于每个核上的力，恰等于根据经典静电理论从其它各个核以及各个电子的位置和电荷计算出来的值。在分子的平衡构型中，作用于每个核上的净力等于零；因此，就这个构型来说，一个核从其它各个核受到的使之远离的分解的力量，恰好被它从各个电子受到的使之接近的化合的力量所抵偿。例如，当H_2^+处在平衡构型时，我们可以说有3/7的电子球形地分布于每个核的周围，其余1/7的电子则分布在两个核联线的中点上，这种分布使每个核受电子的化合作用正好被它受到另一核的分解作用所平衡。这就是说，当分子处在平衡构型时，其内部的原子间分解和化合的矛盾斗争势均力敌，互相抵偿，故相对平衡状态的分子是原子间分解和化合矛盾运动的对立统一体。

如果化学物质中原有的分解和化合矛盾运动的对立统一状态遭到破坏，则体系一定要通过某种途径，调整内部原子间分解和化合的矛盾斗争，使之在新的基础上达到新的对立统一。现以络合物为例进行分析。对于具有d^{10}结构的八面体络合物来说，应具有理想的正八面体几何构型，这时分子中原子间分解和化合的矛盾斗争处于相对的平衡状态。如若中央金属在d轨道上失去一个电子，由d^{10}：$(t_{2g})^6(e_g)^4\longrightarrow d^9$：$(t_{2g})^6(e_g)^3$，体系原来的平衡状态将被打破，分解和化合的矛盾斗争也将由平衡变成不平衡，这时分子将发生变形，即产生有名的姜-泰勒效应。具体的怎样变形，与失去了那个电子有关。若失去的是$d_{x^2-y^2}$轨道上的一个电子，即d^9：$(t_{2g})^6(d_{z^2})^2(d_{x^2-y^2})^1$，分子的构型将由正八面体畸变为具有四个共面的短键和两个与此面垂直的长键构成的变形八面体。若失去的是d_{z^2}轨道上的一个电子，即d^9：$(t_{2g})^6(d_{x^2-y^2})^2(d_{z^2})^1$，这时得到一个相反的变形，即产生两个短的位于同一直线上的键，以及垂直于短键在同一平面中的四个长键的变形八面体。1957年，有人对上述两种情况作过详细地计算，认为具有四个短键的构型是稳定的，这个结论后来得到事实的证明。姜-泰勒效应的结果，使原来简并的两个e_g轨道进一步发生能级分裂，降低一个轨道的能量，消除了这种简并性。这时，三个电子在两个非简并的e_g轨道上排布之后，将会获得$\delta/2$轨道能量，这就提供了变形的动力。

变形之后，使络合物在新的基础上〔即d^9：$(t_{2g})^6(e_g)^3$〕达到了分解和化合矛盾斗争的新的对立统一。

按照类似的分析同样可以说明，金属键的物质，则是由金属的自由电子和金属原子及离子所组成的结晶格子之间相互结合的化合作用与其同性电荷间相互分离的分解作用，构成矛盾运动的对立统一体。

综上分析，说明一切化学物质都是内部原子间分解和化合矛盾运动的对立统一体。

化学物质的转变是分解和化合矛盾运动的转化过程

化学运动中的化合使原子相互靠近，甚至结合成分子；化学运动中的分解，一方面使分子内部的原子不能无限制的靠近，另一方面又力图使分子分解为原子。二者相互对立，互相排斥，不断斗争。斗争是绝对的，统一（任何稳定化合物的存在，任何平衡状态的存在）是相对的，有条件的。化合物的分解（统一物的破裂）是不可避免的。正因为如此，化学反应才有可能进行，才能由反应物向生成物转化，实现化学物质间的转变。可见，化学物质的转变是通过化学反应来实现的。

化学反应由于分法不同而分为不同的类型，如广义酸碱理论认为化学反应就是两大类：一类是酸碱反应，其中又有酸碱中和反应，酸取代反应，碱取代反应和酸碱双取代反应；另一类是氧化还原反应。通常则是将化学反应按原子分解和化合的具体形式分成分解反应、化合反应、置换反应、复分解反应、氧化还原反应、聚合反应和缩合反应等。但是，不管怎样划分化学反应的类型，化学反应中的基本矛盾都是分解和化合，这并不随着划分化学反应类型的不同方式而改变。

化学反应是分子中原子间分解和化合矛盾双方的转化过程。两个原子在形成分子的时候，要实现原子间分解和化合矛盾双方的相互转化，按分子轨道理论就必须满足成键三原则，才能产生有效的键合作用而形成分子。对称性匹配原则是说，只有对称性相同的原子轨道才能组合成分子轨道，对称性不同的原子轨道是不能组成分子轨道的。它回答了基本矛盾双方相互转化的可能性，即两个原子形成分子的可能性。能量近似原则和最大重叠原则说明了基本矛盾双方在转化过程中所需要的条件，这些条件满足的好，键合作用就强，形成的分子也就稳定，满足的不好，形成的分子的稳定性就要差些，甚至不能形成。

分解和化合矛盾双方相互转化的条件，就是化学反应所需要的条件。“唯物辩证法认为外因是变化的条件，内因是变化的根据，外因通过内因而起作用。”① 化学运动的内因就是参加反应的各物质的内部矛盾，也就是组成这些物质的各原子间的分解和化合的矛盾。例如，一氧化碳、氢气和甲醇分子之间存在着原子间分解和化合的矛盾斗争而相互转化的内在矛盾，即有了“变化的根据”，这就是内因。但是，要实现这种转化仅有内因还是不够的，必须还要有适当的外部条件。在化学反应中要经常研究温度、压力、光照、辐射、催化剂等条件的影响，而这些条件都是外因。提高温度、光照、辐射等都是从外部对反应系统供给能量，增加原子间分解的作用，激发矛盾的斗争，促进化学

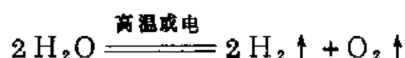
---

① 《毛泽东选集》（合订本），人民出版社，1966年，291页。

缓反应的进行。催化剂则是为化学反应找到一条"捷径"，加速矛盾的斗争，使事物尽快转化，而它本身无论从性质和数量上，反应前后基本上没有变化，这些条件又都必须通过事物的内因才能起作用。一氧化碳和氢气由于具有转化为甲醇的内因，所以在有了适宜的温度、压力和催化剂的条件，就可以使之转化为甲醇。一切岩石，无论如何升温、加压、加入催化剂，也都不会由它变成甲醇，这是因为它没有变化的根据，即内因。相反，在内因已经具备的前提下，若没有适宜的外界条件，转化也将成为一句空话。氢气和氯气具备转化为氯化氢的内因，但要实现其转化，就必须在很高温度或在高能紫外光的照射条件下，即在一定的外因条件下，转化才能实现。在内因、外因都具备的条件下，反应物向生成物的转化是具有一定的化学反应机理的。化学反应的机理具体体现了基本矛盾双方相互转化的过程。

下面试举四例，分析一下基本矛盾是如何在具体的化学反应中相互转化的，由此也反映了化学中矛盾运动的一般情况。

（1）水的分解



$$2H_2O \xrightarrow{\text{高温或电}} 2H_2\uparrow + O_2\uparrow$$

这个反应的实际过程是比较复杂的。但从总体上看，可以认为这个反应是分两步进行的：第一步是水分子分解成它的组成部分——氢原子和氧原子，即$H_2O \rightarrow 2H + O$；第二步是两个氢原子化合成氢分子，两个氧原子化合成氧分子，即$2H \rightarrow H_2$，$2O \rightarrow O_2$。显然，反应过程中的基本矛盾是原子的分解和化合。但是，这两步绝不是截然分开的，并不是说只有完成了第一步之后，才能开始第二步。矛盾的双方是互相依存的，原子的分解和化合是同时进行的，即第一步开始进行的同时，第二步也就开始进行了，第一步停止了，第二步也随即停止。所以，基本矛盾贯穿于反应的始终。

水分子中，原子间分解和化合的矛盾斗争达到平衡状态时，原子间以键能(O—H)为110.6千卡/摩尔，键长（O—H）为0.96Å和键角（HOH）为104.5°的能力和形式结合起来。当外界对水加高温或通以一定电压的直流电时，水分子从中吸收了能量，加剧了原子间的矛盾斗争，增加了分解的因素，化学键开始松弛。当在一定压力下达到或超过水的分解温度（或分解电压）时，原子间的分解因素转化为矛盾的主要方面，这时氢原子和氧原子之间的化学键开始断裂，实现原子的分解。所加的高温或通的直流电，则是实现这种转化的条件。同样，分解所形成的氢原子和氧原子，具有较高的能量。当它们失去一定的能量之后，化合将转化成矛盾的主要方面，原子间将用化学键联结起来，即两个H原子以键长为0.74Å，键能为4.476eV结合成H_2，两个氧原子以键长为1.207Å，键能为5.080eV结合成O_2，实现原子间的化合。

（2）合成氨

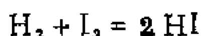


$$N_2 + 3H_2 \underset{\text{铁触媒}}{\overset{\text{高温高压}}{\rightleftharpoons}} 2NH_3 + 22\text{千卡}$$

目前根据"活性中心"理论，认为氮、氢合成氨的反应在铁触媒的表面上进行。大致经过下列几个过程：N_2(气)$\longrightarrow$2N(铁催化剂吸附)$\xrightarrow{H_2}$2NH（吸附）$\xrightarrow{H_2}$$2NH_2$（吸附）$\xrightarrow{H_2}$$2NH_3$（吸附）$\longrightarrow$$2NH_3$（气）。

在一般条件下，N_2分子内部的原子间尽管存在着分解和化合的矛盾斗争，但由于二者的作用相等，N_2分子处于相对稳定状态，原子间是成键的。但在高温、高压、铁作催化剂的条件下，N_2分子被铁催化剂所吸附，这就使得原子间的联结松弛，破坏了矛盾的对立统一体，使原来的分解和化合作用相等转化为分解成了矛盾的主要方面，这时，原子间的化学键就要断裂，实现了分子的分解。N_2分子分解后所形成的2N和H_2分子间开始时是处在分离的状态，分解是矛盾的主要方面，但当H_2分子在铁催化剂表面“分解”成为H原子，并放出一定的能量之后，处于支配地位的矛盾的主要方面也就由分解转化为化合，实现N原子与H原子化合成为NH原子团。此原子团继续在铁表面与H_2分子分解出的H原子相互作用，直至生成相对稳定的新分子——NH_3。合成氨的整个反应历程，总是在原子间“分解”和“化合”的矛盾斗争中，相互发生转化，直至最终完成氨的合成。合成的氨正是“分解”和“化合”对立统一的产物。

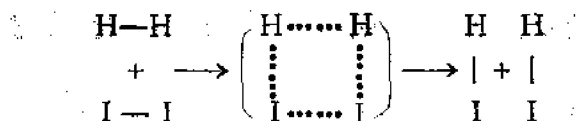
（3）HI的合成



$$H_2 + I_2 = 2HI$$

这个反应式只代表反应的总结果，并不表示反应的过程。

HI合成反应的机理，长期以来被人们认为是双分子四中心反应，即



1965年，分子轨道对称守恒原理提出来之后，人们看到上述的反应机理是不可能的。因为，第一途径中H_2的HOMO（σ）和I_2的LUMO（σ^*）对称性不一致，不能反应。第二途径中H_2的LUMO（σ^*）和I_2的HOMO（π^*），虽然对称性是一致的，但由于I的电负性比H大，所以I_2的π^*分子轨道中的电子不能进入H_2的LUMO中，结果也不能发生反应。结论：分子反应是禁阻的。这就是说，在合成HI的过程中，基本矛盾双方的转化过程，不会沿着分子反应的途径进行。

实际上这是个自由基反应。因为I原子的LUMO（$5P_x$其中只有一个电子）与H_2的HOMO（σ）能量相近，对称性又允许，可以沿X轴发生重叠而反应。这就是说，在合成HI的过程中，基本矛盾双方的转化过程，是沿着自由基反应的途径进行的。这一反应大致经过如下步骤：

首先是在高能紫外光的照射下，一个I_2分子吸收一个光子，能量大大增高，这份能量激发起I_2分子中的两个I原子强烈振动，使得I_2分子内两个I原子之间的化合作用被分解作用所战胜，分解成了矛盾的主要方面，由此发生I_2分子内的价键断裂，分解成两个I原子，即



$$I_2 \xrightarrow{h\nu} I + I \qquad (1)$$

I_2分子内矛盾的解决，接着又产生了新的矛盾，即I原子同H_2分子之间的矛盾。一方面，H_2分子内两个H原子之间由于共价键而相互结合着，这是保持H_2分子稳定性的化合因素；另一方面，由于光子的离解作用所产生的I原子，又有从H_2分子中夺取一个H原子，而形成化合物HI的趋势，这是破坏H_2分子稳定性的分解因素。矛盾双方斗争的结果，由于新产生的I原子，其化学性质相当活泼，它立即和H_2分子发生反应，即



$$I + H_2 \longrightarrow HI + H \qquad (2)$$

这个反应所以能够进行，是由于I原子和H_2分子起反应所需要的活化能比I_2分子和H_2分子直接起反应所需要的活化能小得多，因而I原子一经产生后，就能很容易和H_2分子起反应。矛盾斗争的结果，使得H_2分子中两个H原子间的分解作用战胜化合作用，这时原子间的分解成为矛盾的主要方面，所以H_2分子分解成为两个H原子。与此同时，H原子和I原子间的分解和化合的矛盾斗争，化合则转化为矛盾的主要方面，从而两者化合成HI分子。

但是，由于新产生的H原子化学性质更活泼，它会引发与I_2分子反应，即



$$H + I_2 \longrightarrow HI + I \qquad (3)$$

反应的结果，使I_2分子内两个I原子间的分解作用战胜化合作用，分解因素转化为矛盾的主要方面，这又使得I_2分子分解为I原子。与此同时，H原子和I原子间的化合作用战胜分解作用，化合又转化成为矛盾的主要方面，形成HI化合物，同时又有一个I原子产生。产生的I原子同H_2分子又发生矛盾，I原子又引发步骤（2）的反应。这个过程可以一直继续下去，直到活化中心H原子和I原子，由于它种原因从链式反应中消失为止，这样的反应可以进行数万次。这种在很短时间内进行的链式反应，就使得体系的温度相继增高，这又反过来加速了自身反应的进行，使之I_2分子和H_2分子化合成碘化氢——HI。

上面的链式反应，都是在物质内部原子间的分解和化合的矛盾运动中进行的，两者在一定条件下可以发生互相转化，最终合成了碘化氢（HI）。

（4）乙烯催化加氢



$$H_2C = CH_2 + H_2 \xrightarrow{Ni} CH_3 - CH_3$$

这个反应中的分解是乙烯分子中π键的断裂，以及H_2分子中σ键的断裂；化合是每个碳又与氢形成了一个新的σ键，从而使乙烯转化为乙烷。反应的基本矛盾是分解和化合。

现在讨论在反应过程中，基本矛盾双方转化的途径和条件。根据分子轨道对称守恒原理，在第一途径中，乙烯的HOMO（π）和H_2的LUMO（σ^*）对称性不一致，不能反应。在第二途径中，乙烯的LUMO（π^*）和H_2的HOMO（σ）对称性也不一致，因而也不能发生反应。结论：乙烯加氢不能直接进行，是对称性禁阻的。这就是说，在乙烯加氢的过程中，基本矛盾双方的转化是不能沿着直接加氢的途径进行的。

当有催化剂Ni存在时，由于Ni原子的HOMO（d_{xz}）与H_2的LUMO（σ^*），以及Ni原子的LUMO（d_{z^2}）与H_2的HOMO(σ)都是对称性允许的，因此将会发生电子转移，形成了σ-π键，得到了H_2被催化剂表面吸附的H-Ni-H体系，这种体系与乙烯的LUMO（π^*）是对称性允许的。可见，催化剂在这里起到了改变对称性的作用，使乙烯加氢由对称性禁阻转化成对称性允许，从而使乙烯加氢得到实现。

通过对乙烯催化加氢机理的研究，使我们看到分解和化合基本矛盾双方通过直接加氢的途径是不易发生转化的。但是，如若改变一定的条件，有催化剂Ni存在时，基本矛盾双方就可以较容易地发生转化，实现乙烯加氢生成乙烷。催化剂在这里起到了改变反应途径，降低反应活化能的作用。

以上仅是对四个化学反应实例的矛盾运动分析，讨论了化学物质的转变。实际上化

学运动都无一例外地表现为化合和分解的矛盾，正是这对基本矛盾的又斗争、又统一，促使物质从一种形式转化为另一种形式，由此推动事物的运动、变化和发展。

综上粗略的分析，我们由此得出：

化学运动中的基本矛盾是分解和化合，同时又是化学反应中的内因。内因是化学反应的根据，外因则是反应的条件，在化学反应中二者缺一不可。

在化学反应中分解和化合是同时进行的，并贯穿于反应的全过程中。分解和化合之间的斗争是绝对的，统一是相对的。

由于化学反应有着丰富的内容，所以分解和化合的表现形式也具有多样性。分解可以成为电子、原子、原子团、离子、自由基或简单的分子等，化合也可以成为离子、分子、络合物或高分子化合物等。

分解的过程可以通过原子的分离来实现，这种情况伴随有旧键（σ键，有时还有π键）的断裂；也可以通过失去电子实现分解，还可以通过π键的断裂来实现分解等。化合的过程可以通过原子的结合来实现，这种情况伴随有新键的形成；也可以通过获得电子实现化合等。

通过分解和化合，实现了物质间的转变，与此同时也伴随有各种形式的能量转化，其中尤以化学能、热能和电能间的相互转化较为普遍。

我们通过对化学运动基本矛盾的分析，具体地说明了对立统一规律普遍地存在，是一切事物和过程（包括化学运动在内）运动变化的原因和动力。我们只有认识和掌握这个根本规律才能弄清楚化学运动中的种种复杂现象，推动我们去揭示化学运动中的新领域及其内部奥秘，以利于现代科技事业的蓬勃发展。

王 荣 顺

（五）化学运动中的量变和质变

质量互变规律是唯物辩证法的基本规律之一。“在化学领域中取得了最伟大的胜利。化学可以称为研究物体由于量的构成的变化而发生的质变的科学。”① 一百年来，化学取得了巨大的发展，使人们认识到：物质化学运动中的量变和质变具有极为多样的内容和形式，它们不仅反复证实了质量互变规律的真理性，而且大大丰富了质量互变规律的内容。深入地研究现代化学所揭示的化学运动中的各种量变和质变以及它们的辩证关系，对于丰富、发展质量互变规律的内容和深入理解化学运动的一般原理，都具有重大意义。这里只是作一点初步的探讨。

1. 化学运动中的质和质变

任何事物都可以从质和量两个方面来考察。质是一事物内部固有的区别于它事物的规定性。事物所固有的质是人们认识事物的客观基础，认识一个事物首先就是认识该事物区别于其它事物的特殊的质。研究关于事物质的差异和变化的一般原理对于化学有特殊的重要性。因为化学主要是研究分子（广义的分子）的质变的科学。准确地说，化学

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，49页。

是在原子和分子水平上，主要是在分子水平上，以研究物质的组成、结构和性质为基础，着重研究物质化学反应的规律的科学。物质的化学反应是从反应物转化为产生物的质变，伴随物质化学反应而发生的化学能与其它形式的能量的相互转化也是一种质变；这两种质变有着内在的本质的联系。此外，在研究物质的组成、结构和化学反应时，必然要涉及原子、分子、物体等不同质的物质层次，必须研究这些物质层次的质的区别和相互联系。

十九世纪上半叶，化学在原子分子学说的基础上确立了原子-分子-物体三层次的物质结构图景，开创了化学中的新时代。一百多年来，化学所研究的不连续形式的物质客体大大地丰富了：在原子层次以下人们发现了电子和原子核，原子核由质子和中子组成，在原子和分子层次，人们发现了独立的离子、原子团、自由基等；对于比小分子大的物质客体，人们发现了高分子、胶体粒子、不包含分立的小分子的晶体（如离子化合物的晶体、金属和合金晶体以及金刚石等原子晶体，它们被称为“巨型分子”或“无限分子”）等。此外，物质的化学运动还涉及分子的聚集态（气体、液体和分子晶体）以及非晶态固体等。化学所研究的各种物质客体彼此都有质的区别。例如：分子、高分子、巨型分子等与原子有质的区别，它们分解为原子以后就失去了原物质的化学性质；高分子与小分子不同，不仅其组成原子的数目比小分子多得多，而且有质的区别，例如一种高分子物质没有一定的分子量，只有平均分子量；胶体粒子与高分子虽有某些性质类似，但二者本质上不同，胶体粒子是小分子的聚集体而高分子是由许多重复的链节形成的单个的大分子。可以认为，现代化学所研究的形形色色的物质客体组成了原子核、原子、分子、高分子、分子的聚集态等五个不同质的层次。由此可见，化学研究的对象具有质的多样性。这一点还表现在它们的种类非常繁多方面。目前已知的化学元素已有 109 种，已发现的放射性同位素已有一千几百种，已知的化合物已超过七百万种。

怎样区别不同质的物质呢？事物的质是它本身所固有的，但事物的质又要通过它与其它事物的关系，即它的各种属性，而表现出来。由于事物之间有多方面的关系，所以事物的质要通过它的多种多样的属性表现出来。在化学中，物质的质就是通过它的各种性质特别是各种化学性质表现出来的。例如，硫酸在与碱作用时表现出它具有强的酸性，在高浓度并与强还原剂作用时表现出它的氧化性，在与水作用时表现出它能与水强烈地结合的性能。硫酸正是通过它的这些性质及其它性质，与别的物质区别开来。事物的质具有许多方面，所以表现出同一事物具有多种多样的属性。人们根据实践的需要，有时从事物的某一些属性去把握事物质的某一方面，有时又从它的另一些属性去把握其质的另一方面。例如，对于同一种物质的不同聚集态（水的三态：水蒸气、液态水和冰），在化学方面它们的质是相同的，在热学和分子物理学方面它们则有质的差异。又如，对于同一种元素的各种同位素，原子核内的质子数相同，核外电子的数目和排布相同，所以化学性质相同；但核内的中子数不同，所以原子的质量不同。因此，它们在化学方面具有相同的质，属于同一种元素，但在与原子质量有关的物理性质方面则表现出有质的差异。

然而，物质的性质又是由什么决定的呢？经典有机结构理论认为：分子的化学结构决定分子的性质，根据分子的化学性质可以推测分子的化学结构。现代物理学和化学也认为：原子的结构决定原子的性质，物质的分子或晶体的结构决定其典型的化学的和物

理的性能。物质化学结构的内容主要包括两个方面：（1）分子或晶体内粒子之间的相互作用，特别是原子间的强烈的相互作用即化学键；（2）分子或晶体内粒子（原子、离子、分子）在空间的分布。这两个方面是密切联系着的，因为原子（或离子、分子）之间的作用力是随它们之间的距离而改变的。例如，钠和氯都是元素周期表中第三周期的元素，但钠是活泼金属，氯是活泼非金属，这是由于它们的原子结构不同，核电荷数、核外电子数和电子排布不同。氯化氢和氯化钠化学性质不同，是由于前者是共价键，后者是离子键。金属、半导体和绝缘材料有着不同的导电性，是由于它们具有不同的固体能带结构。大量实验事实和现代科学理论都证明：物质的物理和化学性质是由其结构决定的。

那么，物质的结构和物质的质二者的关系是怎样的呢？长期以来，我国哲学界有一种流行的观点，认为结构是一种量的规定性，结构的变化是量变的一种形式，所举的实例常常主要是化学中的同分异构体和同素异形体①。

这样的分析和论断不完全符合客观实际和现代自然科学的认识。如前面所述，物质化学结构的内容不仅仅是原子在空间的排列次序，还包括原子（或离子等）之间的相互作用，特别是它们之间的强烈的相互作用即化学键，而且后者是主要的。原子在空间的分布由原子间吸引和排斥的相互作用决定，并对后者有反作用，前者只有通过对后者的影响才能影响物质的主要性质。金刚石和石墨结构上的区别不仅在于原子在空间的排列次序，而主要是碳原子相互键合的方式不同。在金刚石晶体中每个碳原子通过 sp^3 杂化轨道以 4 个共价键分别与其它 4 个碳原子相连接，排布成正四面体结构，每个价电子在成键轨道中都是成对的，键长1.54Å，这种结构的键合力很强，所以金刚石晶体硬度和熔点都很高。石墨晶体是平面片层结构，在每一片层内每个碳原子通过 sp^2 杂化轨道以 3 个共价键分别与其它 3 个碳原子连接，形成许多六方形环，键长1.415Å，键合力较强；但在层与层间是靠很弱的范德华力相结合，碳—碳原子间距长达3.35Å，每个碳原子的第 4 个价电子未参加杂化，形成大 π 键，具有自由电子性质。这些就是石墨质地柔软、易裂成片状、能导电和具有金属光泽的原因。乙醇和甲醚结构上的区别也不仅在于分子内原子排列次序不同，而主要在于分子中的化学键不同。它们分子内原子间的相互作用有质的不同，所以两种物质具有不同的性质。恩格斯在论述量变质变规律时，也曾以同素异性体和同分异构体为例，但他并未从中概括出“结构变化是量变的一种形式”这一命题。他曾指出：“物体的各种不同的同素异性状态和聚集状态，因为是基于分子的各种不同的组合，所以是基于已经传给物体的或多或少的运动的量。”②所谓“已经传给物体的运动量”的相对大小，可用各物质的标准生成热数据来衡量。例如，根据实验测定，石墨和金刚石的标准生成热分别为 0 和453.2卡/摩尔。但恩格斯的这一论断并不意味着“分子的不同组合”和“传给物体的运动量”是一回事，正如物质的标准生成热和物质的结构是两个完全不同的概念，虽然它们之间有联系。

随着现代科学的发展，各门科学都越来越重视对于结构的研究。例如，在现代数学中已抽象出序结构、代数结构和拓朴结构，研究这三类结构及其相互渗透已构成了现代

---

① 李达主编：《唯物辩证法大纲》，人民出版社，1978年，300—301页。
② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，47页。

纯数学的中心。因此，结构已成为必须着重研究的新的哲学范畴之一。结构范畴怎样定义？结构属于量还是属于质？这些问题还有待于人们努力研究，从理论上作出正确的概括。但是，从前面的分析可以看出，物质的原子、分子和晶体等聚集态的结构属于质而不属于量，它们的变化属于质变而不属于量变，这样认识才更符合客观实际。

根据对立统一规律，事物的特殊的质是由事物内部的特殊矛盾（主要由其根本矛盾的主要方面）所决定的。因此，研究化学运动中的质和质变，必须弄清楚化学的各种研究对象各自的特殊矛盾。这样做还可进一步深入地认识物质的质和结构的关系。对于非生物界的矛盾，恩格斯曾深刻地指出："一切运动的基本形式都是……**吸引**和**排斥**这一古老的两极对立。"① 现代物理学和化学的成就已经证明：在原子、分子、晶体以及物质的其它聚集态等物质层次，粒子间的相互作用都是以电磁作用为基础的吸引作用和排斥作用的对立统一（简称引斥矛盾）。由此可见，粒子间的引斥矛盾就是这些物质层次的结构的主要内容。各物质层次内部的引斥矛盾的特殊性决定了它们结构的差异和质的区别。在原子内部，吸引作用是原子核和电子之间的库仑吸引作用，排斥作用是由于电子绕核运动而产生的电子与原子核之间的排斥作用，以及电子与电子相互间的库仑排斥作用和泡里排斥作用。这一引斥矛盾就是原子结构的主要内容，决定了原子的质。在分子（包括小分子、高分子和巨型分子）内部，引斥矛盾主要表现为各种化学键的各种化学的吸引作用和排斥作用的矛盾②。分子的聚集态内部的引斥矛盾，则是分子间力和由于分子热运动而产生的排斥作用的矛盾及分子间引力和斥力的矛盾，分子间力比化学键力弱得多。对于同一物质层次的不同物质，它们的质的区别也决定于它们结构内部的引斥矛盾的特殊性。例如，钠原子和氯原子的核电荷数分别为11和17，最外层电子数分别为1和7，因此原子内的引斥矛盾不同，外层电子所受的引斥作用不同，决定了它们的不同的质，从而表现出不同的性质：钠易失去其外层的一个电子，氯易与外来的一个电子结合。对于不同的单质或化合物，不论它们的组成是否相同，其结构一定不同，它们内部的引斥矛盾各有其特殊性，所以具有不同的质，表现出不同的性质，如前面所述的金刚石和石墨、乙醇与甲醚，都是如此。

化学运动中的质变主要就是物质的化学反应，即分子（广义的，下同）的质变，反应物分子转化为产生物分子。所谓物质的化学性质，主要就是物质自身或与其它物质相作用时发生化学反应的性能，既然物质的性质决定于物质的结构，而物质结构的主要内容是其内部粒子间的引斥矛盾，那么，化学反应的过程就是破坏反应物结构和建立产生物结构的过程，其最主要的内容是旧化学键的断裂和新化学键的形成。这个过程是在反应体系内各种粒子间的引斥矛盾又斗争又统一的基础上发生的。原有的化学键断裂时体系要吸收能量，新化学键建立时体系要放出能量，因此在发生化学反应时总要伴随着能量的吸收或放出，即化学能与其它形式的能量的相互转化。在化学反应中常常伴随着另一种质变，即相变。在相变过程中也要伴随着能量的传递和转化。

由于已知的化学物质已有数百万种，所以化学反应即化学质变的具体内容和形式是极为丰富多采、种类繁多的。按照参加反应的物质客体的特点，可把化学反应分为离子

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，55页。

② 请参看本书"关于化学运动基本矛盾的两种观点"一节。

反应、分子反应、原子反应、自由基反应、大分子反应、胶粒反应等。按照反应体系的相数可分为均相反应和复相反应。按照激发反应的手段可分为热化学反应、光化学反应、电化学反应、辐射化学反应等。按照反应热效应的符号可把热化学反应分为放热反应和吸热反应。按照反应过程的机理可把反应分为简单反应（只有一个基元反应）、对峙反应（可逆反应）、平行反应、连锁反应等。按照反应速度与反应物浓度的关系，可分为一级反应、二级反应、三级反应及零级反应、分数级反应等。按照基元反应中参加反应的分子数，可分为单分子反应、双分子反应和三分子反应。在有机化学中，按照反应中物质结构变化的主要特点，可把反应分为许多种类，如加成反应、取代反应、脱氧反应、环化反应、开环反应、裂解反应、加聚反应、缩合反应等。此外，按照反应中是否发生电子的得失（包括电子的转移和偏移）和反应物是否分离，可把反应分为氧化还原反应和非氧化还原反应两大类。反应速度的快慢也有各种不同的情况。例如，在水溶液中进行的离子间的反应非常迅速，可在很短时间内完成。而氢和氧在室温下化合成水的反应极为缓慢，实际上几乎没有水生成；但这个反应如果在800℃的高温进行，则以爆炸的方式瞬时完成。有些反应需要有催化剂加入才能合乎生产的要求。在以上每一种反应分类方法中，所分成的各类反应都各有其特点。由此可见，在化学运动中，质变的形式是极其多样的。同样，相变的内容和形式也是多种多样的。

这千姿百态的化学质变有哪些统一的规律？在化学反应中旧化学键断裂和新化学键建立的过程，究竟是怎样发生的？这是由于反应物分子相互碰撞使分子的动能转化为分子内部的能量，才有可能破坏原有的化学键而发生反应，但只有很少能量相当高的分子（即活化分子）相互碰撞时才能发生反应。对于一定的反应，在一定条件下其活化能有一定数值。如活化能较小，则活化分子占全体分子的百分数就较大，反应就较快。升高温度可提高全体分子的平均能量，增大了活化分子百分数，从而提高了反应速度。反应物分子相互碰撞时究竟发生了怎样的变化呢？为了解决这类问题，1930至1935年间艾林和珀兰尼等人在统计力学和量子力学发展的基础上提出了过渡状态理论。这个理论认为，反应物分子进行有效碰撞后，首先形成一个不稳定的过渡活化络合物，在活化络合物中旧化学键已减弱，但尚未完全断开，新化学键已在建立中，未完全形成。活化络合物可以分解为产物，这一步是慢步骤，它决定了反应速度。由于原子间的吸引作用和排斥作用随距离而变，体系的势能E也随之不断地变化。距离不同体系的E值也不同，不同的E值构成体系的势能面，而活化络合物处在马鞍形能峰（鞍点）的状态。这时体系的势能虽然比反应物和产生物都高，但比其它的能峰低，对于较简单的反应体系，可以根据量子力学和物质结构知识计算出势能面，并根据鞍点的位置推测活化络合物的构型。自从过渡状态理论建立以后，五十年来它得到不断的发展和广泛的应用，近二、三十年来，在过渡态概念的启发下，已提出多种热反应速度理论。

从过渡状态理论的成功可以得出以下几点结论：（1）化学运动中的质变只有在反应物分子的势能提高到一定程度（达到鞍点的高度）后才能发生，即在量变达到关节点以后才能发生。（2）反应物势能的变化和活化络合物的形成及分解，都是在组成反应物分子的诸原子之间吸引和排斥矛盾的基础上发生的，化学质变是吸引排斥矛盾双方又斗争又统一的结果。（3）化学质变（化学反应）是一个否定之否定的过程。首先，稳定的反应物分子被否定，变为不稳定的活化络合物，然后活化络合物又被否定，变为稳

定的产生物分子。由此可见，那种认为在化学运动中不存在否定之否定的观点显然是不正确的。（4）恩格斯有一段名言："辩证法不知道什么绝对分明的和固定不变的界限，不知道什么无条件的普遍有效的'非此即彼！'，它使固定的形而上学的差异互相过渡，除了'非此即彼！'，又在适当的地方承认'亦此亦彼！'，并且使对立互为中介"①。活化络合物正是这种在反应物和产生物之间的"亦此亦彼"状态，过渡状态理论为辩证唯物主义的自然观和思维方法提供了新的重要例证。以上几点结论对于任何具体的化学反应都是适用的。

2.化学运动中的量和量变

量是事物存在和发展的规模、程度、速度等可用数量表示的规定性。量和质一样都是事物本身所固有的规定性，都有许多方面，都具有多样性。事物的每一种属性，都有自己的量。化学运动中的量也是多种多样的。研究化学运动规律的理论可以分为三大领域，即关于物质的组成和结构的理论，关于物质的平衡性质的理论和关于物质变化动力学的理论。我们可以按照这三个领域把化学运动中多种多样的量分为以下三类：

第一、关于物质的组成和结构的量。它又可分为以下几小类：(1)关于物质的质量和组成的量。如物质的质量、密度、分子量、当量，元素的原子量，物质的重量百分组成，分子中各元素的原子数目等。对于定组成化合物，其组成为一定数值；对于组成可变的非整比化合物，其组成一般为一数值范围，例如由Cu和Zn组成的黄铜中的β相，其中Cu原子的分数可在52—55％范围内变化。(2)关于原子结构的量。如原子序数，原子核内的中子数、质量数，四个量子数，核外电子层数和各层内的电子数，波函数，电子云密度分布，各原子轨道的能级，原子的电离能、电子亲和能和电负性，元素的化合价，原子光谱各谱线的波长和频率等。(3)关于离子键和离子晶体结构的量。如正负离子的电荷数，离子半径，正负离子半径比，离子键键长，正负离子的配位数，离子的极化率，离子晶体的晶格常数，晶格能等。(4)关于共价键和分子结构的量。如分子内电子云密度的分布，分子轨道的能极，共价键键长、键角，原子的共价半径和范德华半径，键能，键的折射度，分子的偶极矩等。(5)关于配位键和络合物结构的量。如中心离子的配位数，d轨道上的电子数，d轨道在配位场中能级分裂的分裂能等。(6)关于金属键的量。如金属原子半径，原子的配位数等。(7)关于一般晶体结构的量。如点阵的基本向量，晶胞参数，晶面指标，原子分数坐标，关于晶体对称性的量，衍射指标，晶面间距，X射线晶体衍射所用X射线的波长，衍射强度，结构因子等。(8)其它方面的量，如关于分子间力、氢键、分子光谱、物质的磁性等方面的量。

第二、关于物质的平衡性质的量。可分为以下几类：(1)基本的热力学量。如温度、压力，体系的体积、内能、焓、熵、功函、自由能，以上各容量性质在过程中的改变量，功、体积功和非体积功，热量；恒容热容和恒压热容，过程的热温商，化学势等。(2)热力学函数的规定值和关于热化学的量。如恒容反应热和恒压反应热，各种相变热，物质的生成热、燃烧热，物质的标准生成热、标准生成自由能和标准熵等。(3)关于溶液和相平衡的量。如偏摩尔量，气体混合物中各组分的分压、逸度、逸度系数和化学势，

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，190页。

溶液中组分的蒸气压、浓度、活度、活度系数和化学势，沸点和凝固点，渗透压，多相平衡体系中的相数、独立组分数和自由度，各种相平衡体系的某些特性常数如溶解度、临界温度和临界压力、三相点、低共熔点、相合熔点和不相合熔点、恒沸点、临界溶解温度等。(4)关于化学平衡的量。如反应的自由能变化和标准自由能变化，平衡常数，平衡时反应物的解离百分数等。(5)其它方面的量。如关于电解质溶液和电化学平衡性质、关于表面化学和胶体化学中的平衡性质的量等。

第三、关于物质变化的动力学的量。如化学反应速度，反应速度常数，反应级数，反应的半衰期，反应分子数，阿累尼乌斯经验式中的指前因子，活化能，碰撞理论中的临界能，过渡状态理论中的势能垒及活化自由能、活化焓、活化熵、光化学反应中的量子效率等。此外，还有气体分子运动论中的和关于输运过程的各种量。

除上述三方面的量以外，在化学的各分支学科中，如在分析化学、有机化学、高分子化学、放射化学和核化学等学科中，还有许多其它重要的量。由此可见，由于化学研究对象的多样性和化学反应的复杂性，化学运动中量的种类极为繁多。这表明，与化学运动中多方面多层次和多种多样的质变相联系，化学运动中的量变也非常丰富多采，具有可观的多样性和复杂性。

对于化学运动中的量，如果从各有关数量的性质来考察，则可看出有如下特征：(1)既有宏观量，又有微观量，宏观量与微观量相结合。关于物质的平衡性质的量一般都是宏观量，关于物质结构的量大多是微观量，关于物质变化的动力学的量既有微观量又有宏观量。统计力学是联系物质的微观结构和宏观性质的桥梁，它可以从分子的微观性质（分子的坐标、动量、质量、动能、位能、转动惯量、振动频率及几何构型等微观量）出发，从理论上计算出体系的宏观性质（温度、压力、宏观质量、各热力学容量性质、化学反应平衡常数和反应速度常数等宏观量）。(2)既有物质的量，如原子数、质子数、电子数、浓度、各种粒子半径、键长等，又有运动的量，如粒子的能量、光的波长、各种热力学量等。这两类量在化学运动中同时出现，反映了在化学运动中物质转化和能量转化相伴发生；也反映了在物质的结构中粒子间的引斥矛盾（双方力量对比表现在粒子的能量中）和粒子在空间的分布（表现于键长、键角、粒子半径、配位数、晶胞参数等）这两方面的相互联系。(3)既有反映必然性的确定性的数量，又有反映或然性的随机性的数量。化学运动中的量多数是确定性的量，随机性的量不多，在前面列举的许多量中，主要就是波函数和电子几率密度分布是随机性的量。但它们非常重要，是现代化学键理论中最基本的量。此外，在化学统计力学中，还有一些重要的随机性的量。(4)在确定性的量中有一部分量不能确定其绝对数值，而只能确定其相对数值或在过程中的改变量。这主要是指能量及与能量有关的量。对于宏观量中的内能、焓、自由能、功函等，只能确定它们在过程中的改变量或相对于标准态的规定值。对于微观量中原子轨道或分子轨道的能级，一般主要是确定它们的高低次序、各能级相对于某一势能零点的相对值以及电子在两个能级间跃迁时的能量改变值。对于微观粒子运动的动能，只能确定大量粒子动能的平均值。(5)在确定性的量中，既有离散性的量，又有连续性的量。按所反映属性的特点，对各种量分别用自然数、整数、分数、实数等不同种类的数表示。对于许多离散性的量，如分子中各元素的原子数，原子核中的质子数、中子数、质量数，核外电子数、电子层数，主量子数、配位数等都用自然数表示。离子的电荷数、磁

量子数用正负整数表示。自旋量子数用分数正负$\frac{1}{2}$表示。对于连续性的量，则一般用实数表示，如温度、压力、内能、熵、热量等各种热力学量，浓度、活度，键长、键角，各种粒子半径，平衡常数，反应速度常数等都用正实数表示。而反应和相变等过程中热力学函数的改变量等，则用正负实数表示（因过程有正逆两个方向）。此外，对于某些问题还需要使用复数、向量和序量。波函数除用实函数表示外，也可用复函数表示，这时要用复数。晶体结构的某些性质要用向量表示。在反映原子轨道、分子轨道的能级高低次序时实际上用了序量。对于化学反应有重要意义的是原子最外电子层及次外电子层中的电子和分子轨道中的前线轨道（最高被占轨道HOMO和最低空轨道 LUMO）。在讨论这一类问题时实际上用了序量。

区别事物的质是认识事物的开始，而由质进到量，则是对事物认识的深化。马克思曾指出，一种科学只有当它达到了能够运用数学时，才算真正发展了①。一百年前，数学在化学中的运用，还仅仅限于“最简单的一次方程式”②。以上对于化学运动中各种量的初步分类和分析，表明一百年来数学在化学中的运用大大地前进了。这从一个侧面反映了一百年来人类对于化学运动的认识的巨大进步，化学的研究经历了并继续经历着从定性到定量、从宏观到微观、从简单体系到复杂体系不断深入不断扩展的发展过程。

对于化学运动中多种多样的量变形式，需要着重讨论一下连续性的量变和不连续性的量变两种形式的区别。在化学运动中，许多连续性的量在过程中的变化是这样进行的：这个量从体系处于始态时它的某一数值变到体系处于终态时它的另一数值，在过程中它经历了这两个数值间的一切数值。这就是所谓连续性的量变。例如，一个宏观体系温度的改变，压力的改变，某些组分的浓度的改变，当改变温度时体系的某一热力学函数或反应平衡常数、反应速度常数的改变等等，都是连续性的量变。但是，离散性的量在过程中的变化不可能是连续性地进行的，而只能是在一群离散性的数量中从一个数值跃迁到另一个数值。这种从一个数值跳跃到另一数值的量变就是所谓不连续性的量变，也可称为跃迁式的量变。化学运动中常见的跃迁式量变有以下几种情况：(1)在化学反应或相变前后物质的组成或其它属性的量发生了跃迁式的变化。例如，在反应$2CO+O_2 \rightleftharpoons 2CO_2$中碳的氧化物一个分子中的氧原子数从1跃变到2；在反应$CH_2=CH_2+Br_2 \rightarrow CH_2BrCH_2Br$中有机分子中的溴原子数从0跃变到2等。(2)在原子或分子中，电子的运动状态从一个轨道跃迁到另一个轨道时，体系的能量从一个能级跃迁到另一个能级。例如，氢原子当其电子从基态跃迁到第一激发态时，E从$-13.6eV$跃变为$-3.4eV$。(3)在举例说明质的差异基于量的差异时或在别的情况下，人们常常将两个对象的同一种量的数值加以比较（不管这两个对象能否实际上互相转化），并把这种比较说成“量的增加或减少”，这种情况也可看作跃迁式的“量变”。这时所比较的量既可以是离散性的也可以是连续性的，例如，比较周期表中氮和氧元素的原子序数，比较碳氢化合物同系列中相邻两种化合物的C和H的原子数，比较两种物质的标准生成自由能等等。在同一个质变过程中常常既有某些量作连续性量变，又有另一些量作跃迁式量变，例如当温度

---

① 参见拉法格：《回忆马克思》。

② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，249页。

升高到约3000K、压力增大到大于125千巴时，石墨能直接转变为金刚石。在这一过程中温度的升高和压力的增大都是连续性量变，而物质的另一些属性则发生了跃迁式量变，如每一个碳原子的共价键数目从4变为3，键角从109°28′变为120°，标准生成热从432.2卡/摩尔变为0。我们认为，将量变形式划分为连续性量变和不连续性量变，在理论上是有重要意义的。化学运动中连续性量变和跃迁式量变的对立统一，是自然界中普遍的连续性和间断性的对立统一，以及微观客体波动性和粒子性的对立统一，在化学运动中的一种表现。

3.化学运动中量变和质变的辩证关系

以上我们分别讨论了化学运动中的质和量、质变和量变。但事物的质和量是又对立又统一的。事物的量都是一定质的量，是一定质的各种属性的量，事物的质都是一定量的质。体现事物质和量对立统一的是“度”。度是事物保持自己质的量的范围、幅度、限度。一般度的两端都存在两个界限量，称为关节点。度就是在关节点范围内的幅度，当事物的量保持在度的范围以内时事物的质保持不变，当事物的量的变化超出了度的范围，事物的质就发生变化，这时量变引起质变。例如，在一个标准大气压下，在0℃至100℃之间水保持为液态，温度高于100℃水就变成水蒸气，低于0℃就变成冰。0—100℃就是液态水的度，0℃和100℃是它的两个关节点。相平衡体系中的许多特性常数，如沸点、熔点、晶型转变温度、临界温度、溶解度；化学反应中的燃点、分解温度等都是各种质的临界点。“一度两点”的格局有很大的普遍适用性，但它是否对事物的一切量变都适用呢？化学元素的原子核电荷数改变1，就是另一个元素了，“一度两点”的格局也适用吗？有的论者认为仍然适用。他们写道：“试看氮、氧、氟这三个元素的核外电子数，分别是七个、八个、九个。作为氧元素的度，应该是八个核外电子的总量。它的极限，则不能是这一总量，而是分别和氮、氟交错的两个极点。在氧和氮之间，由于从有七个核外电子的氮向有八个核外电子的氧的转化，或是相反方向的转化，关键在于第八个核外电子的增减。在氧和氟的相互转化过程中，关键在于第九个核外电子的增减。这第八个和第九个核外电子，正是氧元素度的两个极限，前者是和氮的交错点，后者是和氟的交错点。可见，化学元素变化过程纵然具有某种特点，但是每一个化学元素核外电子数的总量和它的两个极限还是明确可分的，因而‘一度两点’的基本格局仍然是明确无误的。”[①]我们认为，这样的分析是不正确的，因为氧原子的核外电子数绝不可能在8和9之间变化，一种元素的核电荷数只能有一个定值，它是离散量不是连续量，它的量变是跃迁式量变。这时度的范围限于一个定数，这是“一度一点”的格局（或者说两点合为一点）。事物的质是多方面的，具有多种属性和多种量，既有连续量，又有离散量。对于连续量的变化，常常具有“一度两点”的格局；对于某些(不是一切)离散量的变化，可能出现“一度一点”的格局。事物的质是由其根本矛盾的主要方面决定的。在化学领域中，物质的质是由物质内部最重要的引斥矛盾的主要方面决定的。这一矛盾双方的力量消长的量变一般表现在能量上，而能量的量变不超出一定数量范围，物质的质不会改变。所以对于引斥矛盾双方力量对比的量变，“一度两点”的格局一般是

① 杨大奇等：“论度和关节点”，载《中国社会科学》1980年第6期，72页。

适用的。例如，决定水的物态的矛盾是分子间引力和分子热运动（表现为排斥作用）的矛盾，在液态水中分子间力是矛盾的主要方面，升高温度时分子热运动的平均动能随之增大，排斥作用加强，当温度升高达到了沸点以后，引斥矛盾双方力量对比的量变达到了关节点，继续加热将使矛盾主要方面发生转化，水变为水蒸气。要使一种化学元素变为另一种化学元素，必须促使原子核内核子间的引斥矛盾双方的力量对比发生量变，达到其关节点才行。

恩格斯在论述质量互变规律时指出："在自然界中，质的变化——以对于每一个别场合都是严格地确定的方式进行——只有通过物质或运动（所谓能）的量的增加或减少才能发生。"又指出："自然界中一切质的差别，或是基于不同的化学成分，或是基于运动(能)的不同的量或不同的形式，或是——差不多总是这样——同时基于这两者。所以，没有物质或运动的增加或减少，即没有有关的物体的量的变化，是不可能改变这个物体的质的。"① 现代化学的成就从化学运动的各方面不断地为恩格斯的以上论断提供了新的例证。

质的差异基于量的差异。橡胶、蛋白质、纤维素等有机高分子化合物之所以具有不同于一般有机化合物的特殊性质，首先是由于它们的分子量特别大，并由许多重复的结构单位组成长链大分子。一般有机化合物的分子量在500以下，而高分子化合物的分子量可以达到几百万。胶体与溶液性质不同，首先是由于分散相粒子的大小不同，在溶液中分散相粒子的平均直径为1×10^{-7}厘米，是以分子或离子分散。在胶体中分散相粒子的平均直径为10^{-7}—10^{-5}厘米，每个颗粒由许多分子聚集而成。按照现代的共价键理论，两个原子如有一对电子，能否成键主要看在两原子核间的区域内电子云密度的大小。例如对于H_2的基态，两核间电子云密度较大，能成键，结合成分子；在其激发态两核间电子云密度为零，不能成键。核间电子云密度这个量的差异决定了能否成键这个质的差异。分子轨道理论认为：两个不同的原子轨道能否组合成有效的分子轨道和有强的成键效应，要遵从两原子轨道能量近似的原则和在可能范围内重叠最大的原则。1981年诺贝尔化学奖获得者福井谦一建立的前线轨道理论认为：分子在反应过程中分子轨道发生变化，优先起作用的是前线轨道，即分子中能量最高的有电子占有的轨道和能量最低的空轨道，前线轨道的对称性在反应中起重大作用。这些都是有关共价键的量制约质的实例。对于离子晶体，正负离子的半径比$\frac{r^+}{r^-}$这个量制约着晶体结构型式，如下表所示：

r^+/r^-	正离子配位数	配位多面体	晶体结构型式
0.225—0.414	4	正四面体	ZnS型
0.414—0.732	6	正八面体	NaCl型
0.732—1	8	立方体	CsCl型

能否形成氢键要受元素的电负性和原子半径这两个量制约。电负性大而半径小的原子X与氢形成H—X键时，另一电负性大的原子Y才能与其中的H形成氢键。至于物质分子中各元素原子数目不同，分子就不同，这一点当年恩格斯已举了许多实例，如O_2和O_3、

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，47页。

氮的各种氧化物、碳氢化合物的同系列等。对于质异基于量异的这一类实例，今天我们都可用物质结构的知识和引斥矛盾的特殊性加以说明。在关于物质的平衡性质的量方面，我们也可以举出许多有重要意义的实例。例如，在等温等压条件下，一个化学反应、相变过程或其它宏观过程能否自发进行，可以用体系从始态到终态的自由能改变值ΔG来判断。如$\Delta G<0$，过程能自发进行；如$\Delta G>0$，过程不能自发进行，反之，逆过程有可能自发进行；如$\Delta G=0$，体系达到平衡。ΔG这个量制约着过程自发进行的方向和限度。对于不能自发进行的反应，由于$\Delta G=\Delta H-\Delta(TS)$，改变温度到一定程度，有可能使$\Delta G$从正变为负，从而使反应变为能自发进行。

量变达到关节点将引起质变，没有量变就没有质变。如前面我们对于水的物态变化所分析的，我们应着重考察与决定物质的质的根本矛盾关系密切的量变。对于化学反应和相变，我们都要着重考察与各原子、分子相互间的引斥作用有密切联系的量变，即原子、分子的能量变化等。对于化学反应，必须使反应物分子的能量提高到活化分子的高度，才能发生反应；更确切地说，按照过渡状态理论，必须使反应物分子的能量提高势能垒那样一个幅度，才能发生反应。为此，可以用不同的激发手段，如升高温度等。但也可使用适当的催化剂，以降低活化能和势能垒。

不仅量变要引起质变，质变也要引起新的量变。不同的质具有不同的量，化学反应的产物具有与反应物不同的量，包括组成、结构、平衡性质等各方面的量，这是很显然的。相变也是如此。例如，石墨在高温高压下转变为金刚石，金刚石的密度、硬度、熔点、导电率、标准生成热等热力学量规定值以及许多内部的结构量，都与石墨不同。

量变和质变的辩证关系还表现在量变中有部分质变，质变中有量的扩张，在化学运动中这两种复杂情况都是存在的。部分质变有两种情况：一是阶段性的部分质变，事物的根本性质未变而比较次要的性质发生了变化。例如，金属铁在常温下是立方体心的晶体结构（α－Fe），加热升温到770℃，失去了铁磁性，但晶体结构未变；继续升温到910℃，发生晶型转变，晶体结构变为立方面心的（γ-Fe）；升温到1390℃，又变为立方体心结构（δ-Fe）；升温到1535℃时，才熔为液体。如果把固体熔化为液体看作根本质变，在此过程中就发生了三次部分质变。又如，对于化学反应体系，如果在发生反应以前，先发生了相变，相对于化学反应来说它就是部分质变。二是局部性的部分质变，事物就全局来说性质未变而其中个别部分发生了性质的变化。化学反应只能在能量高的一部分分子发生碰撞时发生，所以在多数情况下都是在体系的局部先发生反应。液体在未达到其沸点的温度下以蒸发的形式气化，只有液面附近少部分能量高的分子逐步逸入气相，也是一种局部性的部分质变。

质变是一个过程，这个过程既要持续或长或短的时间，在空间上也有一个量的扩张过程。如前所述，化学反应的速度有快有慢，化学反应往往先在一小部分分子中发生，有一个从体系的局部向全局逐渐扩张的过程。量变过程也有类似的情况。

总之，在物质的化学运动中，量变和质变既相互区别又相互渗透、相互转化。它们的这种辩证关系是在物质内部大量粒子相互间吸引和排斥的矛盾基础上发生的。这一根本矛盾又使化学质变表现为一个否定之否定的过程。因此，一切物质的化学运动都是辩证地进行的。

许　健

二　化学发展的规律性

研究化学哲学的一个主要目的，是掌握化学发展的规律，促进化学的发展。因此，研究化学发展的规律性是化学哲学中的一项重要内容。

认识化学发展的规律性，将会涉及到多方面的复杂的因素，诸如社会、生产、教育、哲学、化学理论同实践的矛盾、化学不同学派间的争论、化学家的哲学思想和科学思想、化学同其它自然科学之间的相互作用，等等，都在不同程度上影响着化学的发展。这里，仅拟从其中的某些因素，就化学发展的意义和方法、化学本体发展的阶段性、化学概念和学说的演变、化学发展的动力因素、化学家的哲学思想和科学思想等五个方面，对化学发展的若干规律性问题作一探讨，以期能够对现实的化学研究工作有所裨益，并预见未来化学发展的趋势，以更加自觉地促进化学的发展。

（一）研究化学发展的意义和方法

探索化学发展的规律性，首先需要讨论化学发展的几个一般性的问题，包括研究的内容、意义、方法和历史沿革等。这里主要拟就研究的意义，特别是科学意义、方法意义和教育意义，以及研究的方法问题做一探索，以获得一个初步认识。

1.研究化学发展的内容和科学意义

为什么要研究化学的发展，这首先需要了解研究化学发展的主要内容和历史沿革，并需要考察化学发展在整个科学发展中的地位，以及同自然科学和社会科学之间的关系，然后才能较深入地认识研究化学发展所具有的科学意义。

研究化学发展的主要内容

化学发展是整个自然科学发展的一个部分。研究化学发展，主要是探讨化学本体的逻辑发展的规律，研究化学概念、学说和理论的提出、继承和演化，剖析化学家业绩中的思想和方法等，即所谓化学发展中的“内史”部分；此外，还应探讨化学发展同社会生产、经济基础、意识形态、政权制度、文化教育、自然科学等整个社会的相互关系，即所谓化学发展中的“外史”部分。研究化学的发展，应当把内史和外史统一起来加以考察，以便能够全面和深入地揭示出化学发展的规律性。再者，有时还需要专门研究某些国家的化学发展状况。例如由于我国古代化学的杰出成就，就使得世界上的许多国家都有人专门研究中国的化学史，这又叫作“国别化学史”。研究本民族、自己国家的历史，特别是包括化学史在内的科学史，在许多国家内都颇受重视。由于各国的自然环境、地理位置、历史背景及民俗风气的差异，化学科学发展的状况和演变也是不一样的，因此国别化学史也是化学史研究的一个重要内容。

化学作为自然科学中的一门基础学科，是人类认识自然、改造自然、征服自然，从

大自然获得自由的一种重要武器。自从人类掌握了使用火这个变革物质的自然力以后，就开始了最早的化学实践活动。随后出现的制陶、冶金、酿造和染色等早期的化学工艺都是人类生产活动的重要内容。随着整个社会的发展，化学、化学工艺的内容日趋丰富，现在已经深入到人类生活的各个领域，并在国民经济中起着越来越大的作用。由此可见，化学发展的历史悠久，内容丰富，在科学史中占据了一个突出重要的地位。

化学史研究的历史沿革

尽管如此，在过去很长一段时间里，由于历史的局限，研究科学史的人很少，研究化学史的人更少。在十九世纪中叶以前，从事化学史研究的仅是少数学者的业余爱好。十九世纪科学技术的迅猛发展，科学技术的进步对社会经济及整个社会所产生的巨大影响，是有目共睹的。化学这门学科在其中的作用也是人所共知的。研究科学技术的社会功能，研究科学史及化学史逐成为自然科学家、社会科学家一个关心的课题。首先给予科学技术以最科学的评价的是马克思，恩格斯。1883年恩格斯在马克思墓前精辟地指出："科学是一种在历史上起推动作用的，革命的力量。""是最高意义上的革命力量"①。这一深刻的论断就是来自于马克思、恩格斯对科学和科学史的认真考察。为了用自然科学的成果来阐明辩证唯物主义，他们花费了很多精力来熟悉当时科学的最新成就，研究了这些成就的来龙去脉，探索了科学技术的发展规律。同时通过研究，从历史上说明了自然科学同生产和哲学的关系。他们明确指出："科学和哲学结合的结果就是唯物主义"。"科学和实践结合的结果就是英国的社会革命。"②在化学和化学史方面，他们同样收集了大量资料，讨论了许多问题，为他们阐明辩证唯物主义自然观提供了强有力的论证。特别值得提出的是，在他们研究化学和化学史中，有着一位杰出的顾问和助手，这就是优秀的共产主义战士和化学家卡尔·肖莱马。肖莱马主要从事有机化学的研究，在脂肪烃的结构、分类和系统化工作中作出了杰出贡献，同时对化学史也有着浓厚的兴趣。他编写的《有机化学的产生和发展》和他的著作《有机化学教程》、《化学教程大全》一样，在当时的欧美得到了好评并被广泛传播。他一开始就和马克思一道，参与讨论了恩格斯《自然辩证法》一书的写作计划。马克思和恩格斯对自然科学的辩证思想的研究成果中，也有着他的一份工作。

恩格斯的名著《自然辩证法》，不仅是科学哲学，同时也是科学史的一部划时代的著作。这部著作中有关科学史也包括化学史的大量论述和基本观点及研究方法，已成为后人研究科学史、化学史和哲学，学习掌握辩证唯物主义的经典著作。

就在出版恩格斯《自然辩证法》的前后，科学史研究有了重要的发展。美、英、德等各国的科学史学会相继成立。著名科学史家萨顿在美国创办了科学史刊物《ISIS》，等等。科学史作为一门学科开始成长。这时期化学史的研究也有了相应的进展。早期影响较大的化学史专著，是德国化学家、物理化学的奠基者之一、化学史家柯普（H. Kopp，1817—1892）所著述的《化学史》(1847年)。进入二十世纪以后，化学史的研究取得了很大发展。这些成果主要有阿米塔（F. P. Armitage）的《化学史》（1906年），梭普（T.

① 恩格斯："卡尔·马克思的葬仪"，《马克思恩格斯全集》第19卷，375、372页。

② 恩格斯："英国状况"，《马克思恩格斯全集》第1卷，666—667页。

E. Thorpe, 1845—1925, 英)的《化学史》(1914年), 布朗 (A. C. Brown)的《化学史》(1913年),娄里 (T. M. Lowry)的《化学史导论》(1915年), 德拉凯 (M. Delacre) 的《化学史》(1920年), 格瑞伯 (C. Graebe) 的《有机化学史》(1920年), 梯尔顿 (W. A. Tilden) 的《著名化学家, 其人其工作》(1921年), 费斯特 (G. Fester) 的《化学技术的发展》(1922年) 等二十多部化学史专著。但是这时期人们对科学史和化学史的了解仍然甚少。正如英国科学史家丹皮尔 (W. C. Dampier, 1867—1952) 在他的名著《科学史——及其与哲学和宗教的关系》的原序 (1929年) 中所说: "现代科学的巨大宏伟的大厦, 或许是人类心灵的最伟大的胜利。但是, 它的起源、发展和成就的故事是历史当中人们知道得最少的部分之一。"①

随着科学技术在二十世纪上半叶的迅猛发展, 从三十年代起, 科学史和化学史研究有了较快的发展。系统的或专门的化学史著作相继出版。例如, 摩尔 (F. J. Moore) 的《化学史》(1939年), 培利 (A. J. Berry) 的《近代化学·化学发展史简述》(1946年), 芬德莱 (A. Findlay) 的《百年来的化学》(1948年), 佛尔贝斯 (R. J. Forbes)的《古代冶金术》(1950年)等。其中摩尔的化学史影响较大。这时期科学史发展的一个标志是,出版了一批综合性的科学史专著。例如, 萨顿 (G. Sarton)的《科学史导论》(1931年), 沃尔夫 (A. Wolf) 的《科学、工艺和哲学的历史》(1934年), 霍格本 (L. Hogben) 的《现代科学的背景》(1938年) 等。一些卓有远见的科学家、教育家都明确地提出了研究科学史的必要性。法国著名的物理学家郎之万 (P. Langevin, 1872—1946) 积极倡议在科学教育中运用历史的方法, 即科学教育与科学史相结合。伟大科学家爱因斯坦 (A. Einstein, 1879—1955) 也曾说过, 联系科学的发展来追踪理论的形成过程是始终具有特殊的魅力。科学史和化学史研究虽然有了较大发展, 但是作为一门学科, 仍然还未引起社会的重视, 一些学者还认为, 科学史的研究和教育工作是可有可无的。

从第一次世界大战的化学战, 到第二次世界大战的立体战, 科学技术对军事、经济的巨大影响, 给人们留下了深刻的印象。从五十年代起, 在第二次世界大战后的复兴时期, 长足前进的科学技术不停地改变着人们的生活和世界的面貌, 这就不能不强迫人们研究科学史和化学史, 以便掌握它们的发展规律, 预测它的未来。知识爆炸所形成的新的知识结构, 也要求人们更多地了解和研究科学史, 以便跟上时代的步伐。在这种情况下, 一些工业发达的国家, 首先在美国, 科学史的研究和科学史的教育真正受到了社会的重视。他们开始把科学史作为职业性的学术专业列入教育计划, 培养出一批批科学史的专业人才。他们除了活跃在教育系统从事教学和科学研究外, 还有相当多的被招聘到政府部门和经济部门及私人企业中, 在有关科学质询, 经济和科学规划等方面发挥了重要作用。到六十年代末, 国际上研究科学史的机构已经超过350个。目前已约有30多所大学开设了科学史系。在相当一部分学校里, 推广了科学史教育的经验。近三十年美国较受欢迎的理科教科书都充分体现了科学教育与科学史教育相结合的倾向。在日本、英国、德国等国家也有类似的情况。在这种形势下, 一些很有份量的科学史和化学史著作不断涌现。仅从库恩的论文"科学的历史"中就列举出西方在五十年代和六十年代出版

---

① 丹皮尔: 《科学史》, 商务印书馆, 1975年, 1页。

的主要科学史著作达58本。已翻译成中文，并深受欢迎的有贝尔纳（J. D. Bernal）的《历史上的科学》（1957年），梅森（S. F. Mason）的《自然科学史》（1962年），柏廷顿（J. R. Partington）的《化学简史》（1957年），莱斯特（H. M. Leicester）的《化学的历史背景》（1956年），都是这时期出版的重要著作。此外博厄斯的《波义耳和17世纪的化学》（1964年），克罗斯兰德的《18世纪化学的发展》（1963年），多马斯的《拉瓦锡、理论和实验》（1955年），格拉克的《拉瓦锡，决定的年代：1772年关于燃烧的最初实验的背景和起源》（1961年）等，也都是一些很有影响的化学史专著。

科学史（包括化学史）在近三十年这么受重视，主要是科学技术发展以及整个社会发展的需要，也反映了人们对科学史研究和教育的意义有了进一步的认识。

科学史的史实告诉我们，科学家，特别是第一流的科学家，大多很重视科学史。化学家的情况也是这样。例如十八世纪英国著名化学家普利斯特列，就是通过研究科学史，首先是电学史，而步步迈入了科学的大门，发现了许多气体，被后人誉为气体化学之父。这些化学家往往又是化学史的研究者。曾于1807年在其名著《化学体系》中，第一个公开论述了原子学说的英国化学家汤姆逊（T. Thomson，1773—1852），就著有《皇家学会史》（1852年）和《化学史》（1839年）。巴黎大学著名化学教授武兹（A. Wurtz，1817—1884），是第一个在法国支持并讲授日拉尔的同系列和类型论的人，他也著有《拉瓦锡时代到现在的化学史》（1869年）等化学史著作。此外，曾经是法兰西学院教授，后来又担任过教育部长的法国化学家贝特罗（M. Berthelot，1827—1907），在有机化学和物理化学上都曾有过重要贡献，而在化学史研究上成绩更为显著，著有《炼金术的起源》（1885年），《古希腊炼金家文集》（1888年），《古代和近代化学研究导论》（1889年），《化学革命——拉瓦锡》（1890年），《中世纪化学》（1893年）和《考古学与科学史》（1906年）等著作，堪称是一位大化学史家了。还有，物理化学的重要奠基人之一，伟大的化学家奥斯特瓦尔德也对化学史很有研究，他的有关著作有：《精密科学经典著作》（多卷本），《电化学、历史及理论》（1896年）。在无机化学和物理化学研究作出成绩的英国化学家梭普也是一个重要的化学史家，他的著作《化学史论文集》（1894年），《化学史》三卷本（1910—1914年）也是很有影响的。此外还有许多化学家都在化学史研究中作出了贡献。他们都对化学史有着浓厚的兴趣。除了化学史所固有的感染力外，他们还觉得化学史是讲解化学的基本概念和继承化学研究传统的一种重要手段。

研究化学史的科学意义

科学的发展是继承和创新的对立统一。首先要强调的是继承，这是自然科学发展的一个基本的特点。化学也是这样。特别是化学现象比较复杂，就尤其需要在继承前人知识的基础上使化学的认识从比较肤浅和零散的状态发展到比较深刻和系统的状态，从比较片面发展到比较全面。即使是在进行化学革命或创新的过程中，也不能理解是对化学知识继承性的中断。事实上，化学知识的继承和积累仍然是化学革命或创新的前提和必要条件。因而这就需要去了解、熟悉和研究化学发展的历史了。其具体意义主要是：

（1）研究化学发展将会更好地把握化学发展的规律性。化学发展的历史表明，化

学总包括有实用部分（又叫作工艺部分）和理论部分。在化学发展的过程中，有时是这部分占主导地位，有时是另一部分占主导地位，而每当出现这两部分同时繁荣兴盛之时，也就是化学必然取得了长足进展之时。例如在十九世纪下半叶，由于煤焦油综合利用的研究而合成了多种染料，从而创建了以煤焦油为原料的有机合成工业。在研制染料人工合成的大量经验中，德国化学家凯库勒于1865年提出了苯的环状结构学说。这一学说不仅帮助人们认识了苯及其一大批衍生物，促进了有机化学理论的发展，同时也对于进一步利用煤焦油，合成其它产品提供了理论指导。因此十九世纪后半叶，以煤焦油综合利用为中心的有机合成工业得到了蓬勃发展，不仅建立了以合成染料为主体的染料工业，而且还生产了药品、香料、糖精和炸药。德国充分利用了化学家在有机合成方面的研究成果，并兴办和迅速发展了有机合成工业。这些企业不仅纷纷投资创办研究机构，还千方百计地吸收高水平的化学家来解决生产工艺问题，从而使当时的德国化工企业中的化学家和工程师的人数最多。这种相互结合，相互促进的措施，终于使德国的染料工业、化肥工业和炸药的生产等化工生产能得以持世界之牛耳。直到二十世纪三十年代之前仍始终垄断着世界的染料生产，并使德国的化工企业成了德国经济发展的一根重要支柱。这一史例再次表明，化学的基础理论部分和应用研究部分二者是辩证统一的。处理好这种关系，对于化学科学的发展具有至关重要的意义。然而由于人们往往囿于某种工作环境和认识上的局限，而处理不好这种关系，违背了化学发展的规律，影响了化学的发展。显然，了解和研究化学发展的历史，对于人们正确处理这种关系将会是有裨益的。

（2）研究化学的发展还将有助于化学家更好地认识化学同生产及社会的关系，端正研究的方向。因为纵观化学发展的历史，就可以看出，化学首先是来源于生产实践。从古代的制陶、冶金、酿造、染料、药物的制造中都可以看出，化学的产生和发展是与人类最基本的生产活动紧密相联系的。而近代化学也是伴随着资本主义的产生而诞生的，并成了促进资本主义发展的巨大动力。现代化学的诞生仍是如此。例如放射化学的研究和原子核裂变的实现，开辟了新的能源。高分子化学的发展，新型催化剂的研制，导致了一个新兴的材料工业部门的迅速成长，等等。反过来它们又有力地促进化学的进展。化学发展的规律清楚地表明，化学研究必须面向生产，面向社会。化学家应该根据自己的专长，深入到生产和社会生活实际中去，发现、选择和确定自己的科研方向和科研选题，尽可能地使自己的研究能够对社会有较大的贡献。

（3）研究化学发展的进程对于提高化学家的自我修养水平也是必要的。从化学发展中可以看到，尽管化学研究的最初阶段多是属于个人的活动，但是化学的每项成就都是时代的产物，都是集体劳动和群众智慧的结晶，也都离不开前人的知识，以及经验和教训。十九世纪以后，一批批实验室和研究所的出现，开始将化学研究从分散的、单纯的个人活动转向了相互协作的集体活动方面。二十世纪以来，这种变化更为显著，大部分的化学研究都转化为社会化的集体劳动了。研究活动的规模越来越大，直至发展到企业规模或国家规模。例如我国在人工合成牛胰岛素的研究中，就是由几个单位的许多化学家通力合作完成的。在现代化学研究中由于实验要求和技术水平不断提高，任何单独的个人活动都是无法承受的。新的研究结构要求化学家具有良好的科学素质和职业道德。化学工作者应坚持以实验事实为依据，坚持实践是检验真理的唯一标准，反对盲从迷信，

把研究工作建立在扎实可靠的实践基础上。实验程序和方法必须经得起检验，实验的结果必须能够再现。成果必须实事求是，尊重前人和他人的劳动等等。这些准则实际上都是化学发展史上的化学家们共同提出的科研道德标准。遵守这些道德准则在今天主要是集体劳动的化学研究中显得更为重要。此外还应当学习化学史上的伟大先驱者们前仆后继的奋斗精神。化学发展的实践告诉我们，凡是有所作为的化学家，都是百折不回、不辞辛劳、勇于实践、为化学的发展奉献出毕生精力的人。他们的崇高品质永远是后人学习的榜样。显然，学习和研究化学发展的历史将是化学家提高自我修养水平的一条重要途径。

（4）研究化学的发展还将会从历史上化学家的成功中汲取到有益的科学思想和科学方法。化学史上的许多发现和发明，都是同化学家所具有的科学思想和科学方法直接关联的，挖掘、学习和研究乃至借鉴这些科学思想和科学方法，对于今天化学工作者的智慧启迪和提高研究水平都是很需要的。有关这方面内容，本书另有专文介绍。

（5）研究化学的发展亦将丰富社会历史学的内容。因为做为科学史一个部分的化学史，也是历史学的一个组成部分。科学，是一种在历史上起推动作用的革命的力量，因此对于历史学的研究决不能忽视科学发展对社会的巨大作用。目前，一些卓有见识的社会历史学家已经越来越注意到了这一点，日益注意到从科学史的研究中吸取有价值的内容。他们开始同科学史家合作，以对社会历史进行深入研究。现在这种趋势正在发展，并已取得了明显成果。对于化学史当然也是这样。

（6）研究化学史对于哲学的发展将具有促进作用。马克思在《机器·自然力和科学的应用》一书中明确指出："自然科学是一切知识的基础"。科学作为一种以实践为依据，并随着实践的发展而不断更新的知识体系和思想体系，曾是各个历史时期思想解放的先导。随着自然科学领域中每一个划时代的发现，哲学都必然要改变自己的形式。这就说明了自然科学与哲学的密切关系。由此可见，研究哲学，特别是研究哲学史，就需要了解和研究包括化学史在内的科学史。在哲学中，同科学史关系至为密切的是科学哲学和自然辩证法。科学史的研究是科学哲学和自然辩证法研究的科学基础。现在人们已经愈来愈强烈地认识到了这一点。

周 嘉 华

2.研究化学史的方法论意义

一般自然科学方法是人们达到科学认识的工具，是人们科学的、正确的反映客观规律和本质的手段。这种工具或手段是对人们认识自然和改造自然的手段、途径、活动方式等的概括和总结，因而在一定意义上说，科学方法也是自然科学发展历史积累的产物，是自然科学发展历史的结晶。化学史是整个自然科学发展历史的一个重要的方面和组成部分，因而化学史也就为一般自然科学方法论提供了重要的源泉和基础，一般自然科学方法论也是从包括化学史在内的全部科学史中所提炼出来的认识工具和手段。

化学史为一般自然科学方法论所提供的素材，是多种多样和丰富具体的。从历史的横断面来看，每一历史阶段出现的科学方法不是一种，而是有多种方法并存，从历史的纵断面来看，各个不同历史阶段的科学方法都有其不同的特点、规律和理论。而且随着

历史的前进，早先产生的科学方法并不会消失，而新的科学方法又会不断产生。近代化学诞生以后，分支学科日渐增多，每一分支学科在其发展的不同的历史阶段，也有其科学方法上的特点、规律和理论。所以，化学历史发展的水平，也就标志着科学方法发展的水平，从而研究化学的发展史也就必定具有重要的方法论意义。

化学发展与科学方法发展的一致性

化学史从什么时候开始，科学方法也就从什么时候开始。在古代，人们为了制陶、冶铁、酿造、染色、造纸和制火药等工艺发展的需要，产生了观察和试验的方法。这些方法因为缺乏科学的根据和指导，也就带有直观性和一定的盲目性。人们由于要回答自然界物质的本原、构成方式和变化原因等问题，也就在观察和试验的基础上，产生了简单的逻辑思维方法，其中又以缺乏科学前提的演绎法为主要方法。例如，中国的“五行说”和亚里斯多德的“四元素说”,就企图以少量物质的相互作用来演绎出整个自然界的组成和变化。

从十七世纪末至十八世纪的近代化学发展的第一阶段，化学从炼金术脱胎出来后，人们结合医药、采矿、冶金、炼焦、烧石灰和制玻璃等生产实践，发现了化学元素，研究了化学反应问题，开始产生了系统的科学实验的方法。波义耳就曾经明确指出，化学的任务是通过分析实验的方法来研究物质的组成和变化的产物。后来法国的勒梅里（Lémery，N，法国1645—1715）和拉瓦锡又使用重量分析法，把近代实验方法推进到定量研究的水平。有了系统性的实验方法，就必然要对一组实验内部的结果进行比较和分析，进而又需要进行归纳和概括。在此基础上，则需要力图对现象和事实的因果关系进行猜测和解释，因而假说和理论的方法也就随之而诞生。例如，元素论和氧化说是假说和理论方法所建立的科学的理论，燃素说则是这种方法所建立的错误的假说。这个阶段是化学史上实验方法、分析方法和归纳方法为主要特点的时期，假说和理论的方法则占有次要的地位。这个时期的假说和理论从内容上看，是对元素、化合物反应变化初级本质的猜测和说明，从形式上看，结构简单，没有形成公理演绎系统，因而这时的假说和理论都具有描述性的特点，缺乏严密性和精确性。

从十八世纪末至十九世纪末的近代化学发展的第二阶段，化学迅猛向前发展，曾一度成为自然科学中的一门带头学科。一方面，人们在纺织、机械、冶金、造船、采矿、地质、制药等生产实践基础上，全面地、系统地推进了科学实验的方法，使化学自身形成了系统定性和定量的分析技术和物理化学的实验技术。另一方面，化学在宏观领域建立了完整的科学体系，走上了综合发展的时期。在各种类型的假说和理论的建立过程中，逻辑方法和非逻辑方法都得到了出色的运用。从运用逻辑方法来看，是各种逻辑方法综合运用的时期。例如，在原子分子论的形成中，出色地运用了概念、判断、推理、比较、分析与综合、归纳与演绎等方法；在化学热力学的创立中，出色地运用了演绎与归纳、综合与分析等方法，出现了化学史上第一个公理化演绎体系（原理理论体系）。由于逻辑方法的全面运用，就使得这个时期的假说和理论具有了解释性和推理性的特点。从运用非逻辑方法来看，这一历史阶段充满了想象力、幻想、猜测、直觉、灵感、顿悟、机遇等令人惊奇的方法，仅由做梦而获得科学灵感的学者就不是个别的。从化学史上去总结这些“没有逻辑通道”的科学方法，这也是摆在我们面前的一个课题。

从十九世纪末至二十世纪以来的现代化学阶段，人们的认识由宏观进入到了微观，化学发展进入到了更为本质的第三次大综合时期，建立了以原子和分子微观结构为基础的崭新的理论体系。这个时期还在继续。我们初步认为这个时期在科学方法论上的特点是：（1）由于化学日趋综合化以及和物理、生物之间相互联系渗透的加强，也就必然伴随着科学方法上也日趋综合化和统一化。各种理论方法包括数学方法在化学中都得到了广泛和深入的应用。（2）假说演绎法在化学研究中发挥了巨大的威力，量子化学标志着另一种类型的公理化演绎体系（构造型公理体系）的诞生。(3)现代化学实验方法走向精确定量、超微量、超高速、高灵敏和自动化，实验的内容和工具、手段、方式等都在发生变化。因此，在整个实验的过程中理论的渗透和指导也越来越重要。

化学发展史上出现了几次革命和重要的突破，伴随它们的常是科学方法上的革新。例如，近代科学元素论和氧化说的革命所伴随着的科学方法上的革新，主要表现在用系统的、定量的科学实验方法取代了古代直观的、带有臆测性的和盲目性的试验方法。从原子论到周期律的化学突破所伴随着的科学方法上的革新，主要表现在分析与综合、归纳与演绎等相结合的辩证逻辑方法取代了十七和十八世纪的单纯的分析法和归纳法。而以现代化学键理论为内容的化学革命所伴随着的科学方法上的革新，主要表现在科学方法的综合化和统一化。

十九世纪以来，化学与物理、化学与生物的日益交叉，渗透和融合，伴随着这种作用，出现了新的科学方法。例如，热力学与化学的融合，诞生了化学热力学的方法；量子力学在化学中的推广，诞生了量子化学的方法。这两个方法又应用于生命领域，成了研究宏观生命热力学和微观量子生物学的方法。

化学的范畴和理论演化中的方法

化学的基本概念、范畴是人类认识化学运动的阶梯和小的阶段，是人们认识化学运动之网的网上纽结。化学发展的每一个历史阶段，都诞生了一些与之相应的范畴、理论、规律。随着历史的前进，范畴、理论、规律也越来越丰富。化学家把这些范畴、理论、规律按一定方式构筑起来，就成了今天化学这个学科大厦的框架和主体。范畴、理论、规律的威力不仅在于揭示了化学物质世界的本质和规律，而且还在于具有科学方法的功能。当人们用这些范畴、理论、规律来探索未知时，这些范畴、理论、规律就转化为方法，起着方法的作用，这就是科学内容向科学形式的转化，科学认识成果向科学认识工具的转化。我们初步认为这种方法论的作用有两个方面：

从范畴、理论、规律的内容自身具有的意义来看，已知的范畴、理论、规律作为一种已经成熟的规范，作为一种理论的准则，就可以成为以后研究的出发点，为后来的研究起到定向和开路的作用，为新的发现起到航标的作用。例如，“元素”这个范畴，就指导着化学家和物理学家发现了109种元素及其同位素。又例如，元素周期律变换为科学方法后，不仅预见了当时未知的三种新元素“类铝”、“类硼”、“类硅”的存在和性质、而且还发挥了巨大的开路作用，推动着一百多年来化学的发展，指引着人们去探索核素谱和基本粒子谱，成为今天研究粒子的重要方法。

从化学理论体系的构造形式和表述方式具有的意义来看，对于自然科学的发展，它的理论体系的构造由归纳形式发展到演绎形式，标志着科学的一大进步。化学发展的历

史也是如此。例如，化学热力学的构造形式有相互联系的两个部分。第一部分是由逻辑上各自独立的基本概念和三个基本定律组成了热力学公理化体系。第二部分是公理化体系向化学反应、相变过程等的逻辑演绎。这个演绎构造体系的方法论意义表现为：首先，组织和整理了化学史上许多分散的、零散的经验规律，把它们纳入了一个结构严密的逻辑体系之内，使那些经验规律的本质得到了统一的阐明和解释。其次，提供了解决一切化学反应和相变的方向、限度的方法以及数学手段、研究化学史上各种理论体系的构造形成和表述方式的方法论，也还是一个研究的新课题。

历史上错误学说的方法借鉴

人们对化学运动的认识，实际上包含着正确和错误两个不可分割的方面。这也是包括化学发展在内的一切科学发展中不可避免的现象。错误的学说或理论，它同正确的学说或理论一样，包含着深刻的方法论意义。武谷三男深刻地指出：“自然科学中关于错误的历史，可以说是真正有意义的东西；是大有分析价值的东西；是能够阐明自然科学方法的东西。”①除了揭露错误，吸取教训，变失败为成功之母等认识论的总结外，从方法论的角度看大致有两个方面：

一方面，错误的学说和失败的理论本身也都具有一定的观察实验材料作为基础。而且又往往是通过一定的逻辑推理形式得到的。因此，这就使它在人类从不知到知的认识史中具有一定的价值和作用。例如，18世纪曾经认为光有光素、电有电素、热有热素和一切可燃物质都含有燃素等等，在这些认识中都运用了逻辑中类比和归纳的方法。而后诞生的氧化说，虽然在理论上是一个深刻变革，然而在逻辑思路和方法上却也同对立的燃素说不无相同之处。燃素说的逻辑是：

锻烧金属 - Φ═锻渣（Φ为燃素）

锻渣 + Φ═金属

氧化说的逻辑是：

锻烧金属 + 氧═金属氧化物

金属氧化物 - 氧═金属

燃素说和氧化说的共同逻辑形式是充分条件的假说推理形式。氧化说的逻辑思路是从燃素说的逻辑思路中得到启发，并由此类推而来的。所以，化学史上的错误学说作为一种思维方法和思维形式，也具有一定工具性的作用。

另一方面，错误学说对观察和实验方法的正确运用可能具有影响，但它起不到本质上的制约作用，只要科学家们认真严肃地进行观察和实验，就会在实践中有所收获和发现，甚至还会在实验的结果中发现和提出同原来错误学说或观点自身相矛盾的对立结论。燃素说的历史就是这样。恩格斯指出：“燃素说经过百年来的实验工作提供了这样一些材料，借助于这些材料，拉瓦锡才能在普利斯特列制出的氧中发现了幻想的燃素的真实对立物，因而推翻了全部的燃素说。”②这就是说，属于错误的燃素学说中所使用的观察和实验的方法，仍不失去其科学方法的作用和意义。

---

① 《武谷三男物理方法论论文集》，商务印书馆，1975年，89页。

② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，33页。

化学史上除了像炼金术、燃素说这些基本观点都是错误的学说之外，还有一些其它形式，如内容上部分错误同部分或个别正确相混杂的形式，部分错误或片面同部分正确相混杂的形式等等。由于形式上的差异，其中所包含的方法论意义也就有所不同。研究化学史上各种有代表性的错误学说或理论的方法论意义，将会对于今后的化学研究工作具有一定的借鉴作用。

研究化学史有助于掌握科学方法

以对于系统方法的认识而论，从科学史来看，自觉地、明确地把"系统"作为一个科学概念来使用，研究"系统"中精确而具体的规律，这首先还是热力学和化学热力学的功绩。化学热力学要判断一个化学反应的方向和限度，就必须明确而具体地限制于一系统内。其次，化学史上早就明确认识分子整体的性质，不等于其组成部分原子性质之和。由两种以上的原子所组成的系统中，其分子量、质量具有加合性，但其比重、体积等就不一定具有加合性，分子整体的比重、体积可能大于或小于组成原子的比重、体积之和。化学史中这种把"系统"、"整体"作为科学认识方法的重要原则，无疑为现代系统方法的诞生提供了科学的依据。

对于结构方法的认识也是如此。十九世纪中叶，化学就明确把物质的化学结构作为研究对象，科学地概括了"物质结构"、"同分异构"、"结构与组成"、"结构与性质"等基本范畴。后来，物理学、生物学、天文学和地质学都注意自己所研究对象的结构，二十世纪以来，语言学、心理学、社会学和历史学也都着眼于结构问题来认识对象的本质和运动规律，以至还有所谓结构主义哲学的出现，结构方法成为一切自然科学和社会科学的共同方法。由此可见，化学史中结构范畴等为现代结构方法的建立作出了重大的贡献。

此外，化学发展史离不开化学家的实践活动和精神活动，化学家是人类认识化学运动的主体，所以，在他们的实验记录、研究总结、回忆录、传记、手稿和讲演报告中，必然蕴含着各种自然科学方法以及方法论方面的宝贵材料。研究和总结这些第一手的材料，对于丰富和发展自然科学方法论具有重大的理论价值和现实意义。拉普拉斯（Pierre Simon Laplace，法国，1749—1827）曾指出："认识一位天才的研究方法，对于科学的进步，甚至对于他本人的荣誉，并不比发现本身更少用处。科学研究的方法经常是极富兴趣的部分。"① 研究化学历史上的葛洪、波义耳、拉瓦锡、道尔顿、门捷列夫、凯库勒、李比希、奥斯特瓦尔德、吉布斯、路易斯、鲍林、密立根、伍德沃德等等大科学家的研究方法，必将进一步丰富科学研究方法的内容，促进科学方法论的发展，从而将有助于化学以至整个科学事业的发展。

高　兴　华

3.研究化学发展规律性的教育意义

化学发展的历史，是化学科学的孕育产生和发展及其演变规律的反映。在化学教学中运用化学的历史，就可以使教学不只局限于现成知识的静态结论，还可以追溯到它的

---

① 拉普拉斯：《宇宙体系论》，上海译文出版社，445页。

来源和动态演变；不只局限于知识本身，还可以揭示出其中的科学思想和科学方法，使学生受到教益。这样，就可以把化学理论逻辑的推演同人们认识化学运动的过程联系起来，达到逻辑的和历史的辩证统一，不断提高教学质量。

在本世纪初，人们就已经开始重视化学史在化学教学中的应用。1904年，著名法国科学家郎之万，首先积极提倡在科学教学中运用历史的方法①。此后，美国化学会长史密斯（E.F.Smith，1854—1928）②和哈佛大学校长、化学家康奈特（James B. Conant）③，以及著名化学史家贾菲（Bernard Jaffe）④等人又进一步论述了它的必要性。日本著名化学教育家山冈望（1892—1978）则身体力行，在长达六十年之久的教育生涯中，坚持了化学、化学史和化学教育相结合的“三位一体”的原则，受到了日本政府的奖励⑤。1960年，美国开始在26个州的100多所学校进行了所谓HOSC教学法即科学史教育方面的试验，取得了良好效果。最近，日本政府还决定，从1982年起将在高中开设科学史的选修课程⑥，进一步加强科学史的教育，等等。可以看出，化学教学同化学历史的结合，已经成为化学教育发展的一种趋向，应当引起我国化学教育界以至整个科学教育界的足够重视。这里，本文拟就化学史在化学教学中的具体作用问题，提出几点不成熟的看法，供大家讨论。

易于从发展上把握化学知识

化学知识，包括教科书中所反映的化学定律或理论，虽然都是经过实践检验过的科学真理，都包含着绝对真理的成分。但是也应当看到，它们并不是绝对正确和永远不变的僵化信条，也需要得到补充、修正和发展。所以恩格斯说，即使是“**永恒的自然规律**也愈来愈变成历史的规律”了⑦。著名的英国科学家贝尔纳则说，它们也都只不过“是一种有待研究和叙述的程序”⑧而已。

因此，在教学中就不能把教科书上的知识教得过死或过于绝对，而是应当在充分论证它的正确性和绝对意义的同时，也需要适当地说明它的发展性和相对意义，使学生能够从发展的高度上去把握知识，培养科学的创新精神和钻研能力。这一点是非常重要的。瑞士教育家皮亚杰（Jean Piaget，1896—1980）认为，教学的任务并不是让学生“简单接受所提供的每件事情”，而是在于使他们“形成有批判精神，能够检验真理”⑨的科学创造能力。

当然，这样做，也可能会使教学内容产生一种动荡不定和不够完善的感觉。但是诚如郎之万所说，这“倒无须顾虑，因为这是符合于事物的本质的”⑩。

---

① 郎之万，《思想与行动》，三联书店，1957年，113—117页。

② E.F.Smith, *Observations on Teaching of the History of Chemsitry*, J. Chem. Educ. 2. 533—555 (1925).

③ J. B. Conant, *On Understanding Science*.

④ B. Jaffe, *The History of Chemistry and Its Place in the Teaching of High School Chemistry*, J Chem. Educ. 15. 383—389 (1938).

⑤ 廖正衡、赵世良，“日本著名化学史家山冈望”，《化学通报》1981年第12期，46—50页。

⑥ 日本文部省，《高校学习指导要领解说》理科篇，实教出版社，1979年，16—17页。

⑦ 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，216页。

⑧ 贝尔纳，《历史上的科学》，科学出版社，1959年，684页。

⑨ 卢濬，“皮亚杰理论的教育含意”，《光明日报》1982年2月12日。

⑩ 郎之万，《思想与行动》，三联书店，1957年，121页。

怎样才能使学生从发展的高度来全面地把握知识？应当看到，只讲授现成的知识结论是不够的，还需要运用历史的观点去加以分析，即把知识做为历史的产物来考察，从它的孕育、产生和发展的流动中去进行阐述。比如讲授电子云的图像，如果只照课本上的叙述，说它是反映了“电子在原子核外空间某处出现机会的多少”或几率的大小，就会很容易地使学生以为，原子内部核外电子的运动状态，就是毫无疑问地完完全全是绝对如此了，因此，只要照记和照搬就可以，而无须再去多加考虑，更不会想到再去补充、修正和发展它了，从而就会抑制学生的科学思维的潜力。

但是，如果能够适当联系一下人们对原子结构探索的过程，从汤姆逊的“西瓜式”，卢瑟福的“行星式”，到玻尔的“旧量子化”的原子模型，直到玻恩（Max Born，1882—1970）运用几率分布解释的电子云图像，从变动和发展的角度去阐述，就会使学生自然地认识到，每一种模型的提出，在当时看来尽管都是比较合理、甚至是得到过公认的，但是，随着科学实践的发展，有的就要得到补充或修正，有的则甚至是被推翻。它们都不是完美无缺或绝对正确的。因此，对于教科书中今天视为科学真理的电子云的概念的认识，也应当是如此。这就是说，它对于核外电子运动的描述，既是一种比较符合实际并已得到了公认的解释，同时也还是一种不够完善和尚待发展的学说。

实际上，它一直是科学家们长期争论着的一个问题。比如，薛定谔本人就不同意玻恩对他的量子力学所赋与的几率解释；而爱因斯坦更是强烈反对，把“几率的解释”戏呼为“掷骰子。”他对玻恩说：“你信仰掷骰子的上帝”①。而我则“无论如何深信上帝不是在掷骰子”②。他认为究竟谁是谁非，还有待未来的实践来检验。

这样一来，显然就会活跃学生的思想，启发他们的科学探索精神，甚至还可能会为此而立志终生，决心去为揭示微观物质世界的奥秘而献身。陈景润同志立志于哥德巴赫猜想的研究，并取得了突出的成就，不就是萌芽于中学时代的一堂成功的数学课的启发吗？教师在教学中应当想得更深远一些才是。

利于调动学生的学习主动性

现代教育学认为，教学过程的中心并不是“教”而是“学”不是平铺直叙地“讲解”或灌输，而是积极地诱导和启发。具体说来，就是在教师的有力指导下，带领学生自己去“发现”和“研究”问题，使学生能够保持着“一种对新奇事物的兴奋感，其程度要高到足以吸引最能干的人到科学探险的事业里来”③，这样，教师所教给学生的知识，就不致成为他们的一种艰苦负担，而会“作为一种宝贵的礼物来领受”了④。

在教学中运用历史的方法，引导学生去追踪化学发展的足迹，就会获得一种对化学知识的亲近感，增强他们的主动的求知精神。比如，讲述“活泼金属能够跟酸起反应发生置换作用而放出氢气”的一段内容，若是单从知识结论出发或配合以实验的证明，虽然学生并不难接受这一事实，不过，总会是显得有些单调和生硬，很难摆脱他们所处的被动状态。而若能结合一些历史上的情节去说明，情况就会有所改观。

---

① 《爱因斯坦文集》（Ⅰ），商务印书馆，1977年，415页。
② 同上，221页。
③ 贝尔纳：《历史上的科学》，科学出版社，1959年，684页。
④ 《爱因斯坦文集》（Ⅲ），商务印书馆，1979年，310页。

从历史上看，十九世纪初，由于当时化学水平的限制，许多化学家都认为，活泼金属同酸作用所放出的氢气系来自于金属，即活泼金属是“氢的化合物”。那么，他们当时为什么会有这种误解，后来又是怎样得到纠正的，用什么样的实验才能检验出活泼金属究竟是化合物还是元素，等等，通过这些问题就会使学生自然地把自己摆在化学发展的进程之中，缩短同知识间的距离，并同先辈的化学家们“一起”去主动探索。

在此基础之上，还可以联系到1805年盖·吕萨克（Gay-Lussac，1778—1850）的实验检验过程。他当时本来是想测定并证明活泼金属是含氢的化合物。但是，事与愿违，当他以氧为试剂，并企图依照所生成水的含量来测知氢的含量时，结果并未得到过点滴之水。多次的反复的实验结果也是如此。人们由此才恍然大悟：原来活泼金属中并不含有氢，并不是什么“氢化物”，而是一种化学元素。

显然，叙述这样一段戏剧性的过程，就会易于引人入胜，教学效果就会更好一些。过去的实践情况也表明了这一点。十九世纪的意大利卓越化学家康尼查罗（Stanislao Cannizzaro，1826—1910），同时也是一位杰出的化学演说家。他获得成功的一个重要原因，就在于能够向听众展示化学发现的情节和进程，说明一个化学症结是怎样一步一步得到解决的。因此，他的演说就犹如一股由历史上不同化学思想、假说和理论所汇集而成的奔腾激流，倾泻而下，能够使听者欣然而受，兴趣盎然。总之，恰如爱因斯坦所说，联系科学的发展来“追踪理论的形成过程”是“始终具有一种特殊的魅力”的①。所以爱因斯坦研究工作的一个特点，就是喜欢把问题放到历史发展的长河中去追本溯源，或从概念的起源加以探索，进行科学创造活动。

便于从正误对比中深入阐述知识

化学，同其它科学一样，也是沿着一条曲折迂回的道路发展的，是在克服理论同实践、理论同理论等一系列矛盾之中前进的。化学家个人的研究过程就更是如此。

在化学教学中，对于这些曲折，当然无需全部加以跟踪进行介绍，但是也不应当像一些教科书那样全部予以回避，只是单纯地注目于成熟的化学结果，似乎化学的发展总是一帆风顺的。这种没有经过失败或错误考验过而“直接”和“顺利”传授给学生的知识，是比较脆弱和肤浅的。实际上，化学发展中的一些曲折，往往会具有宝贵的教育意义。它可以做为一种反面的衬托或中介，能够从矛盾的冲突中更深刻地阐述知识。笔者认为，这样去进行教学，也正是列宁所强调过的“认识的过程必须是辩证的思维”②的一种体现。是应当加以坚持和贯彻的。

这样，就需要适当地结合化学历史发展中的一些曲折过程来进行教学。比如，对于电离的概念，假如完全从现成的知识结论去正面解释，说明它是“电解质溶解于水或受热熔化时离解成自由移动的离子的过程”，问题似乎很简单，在教学上也不会感到有什么困难。但是实际上，由于没有反面知识的衬托与对照，未能形成认识上的矛盾与冲突，就会使学生浅尝辄止，难以深入领会，他们自我存在的问题也难以暴露和了解。

然而，从历史上看来，当1883年阿累尼乌斯从研究稀溶液电导的实验中发现和提出电

---

① 《爱因斯坦文集》（Ⅰ），商务印书馆，1977年，177页。

② 巴中：《基础研究的效率》，科学出版社，1981年，46页。

离的概念时，就曾遭到了以大名鼎鼎的化学家门捷列夫为首的包括俄、德、英等国许多著名化学家的强烈反对。他们认为，依照戴维（H. Davy，1778—1829，英）和法拉第的经典电化学理论，电解质分子只有在外界电流的作用下，才有可能发生分离，怎么能是“自动地”进行分离呢？岂不是天大的笑话。但是，实际上正是这些权威化学家们自己，在当时还没有弄清楚电解和电离过程的本质区别而犯了错误。有趣的是，这也正是今天的一些中学生所经常容易出现的毛病。

此外，他们还认为，如果能够发生电离，那么，像氯化钠的水溶液中就会自动出现金属钠和具有毒性的氯气，而事实上并没有发生，由此就“证明”了电离学说是一种“无稽之谈”。但是，实际上正是这些著名化学家们自己，包括曾经对化学发展做过划时代贡献的伟大化学家门捷列夫，也同今天的一些初学化学者一样，没有弄明白分子、原子和离子间的本质差别，从而又犯了一个错误。

直到后来，由于范霍夫等人通过电解质溶液“冰点降低反常现象”等一系列精确定量的实验检验以后，才充分证实了电离过程的存在，确立了电离学说。

经过这样的正误对比，就会使学生在认识的矛盾不断冲突中把知识理解得更为深刻，而且也能避免在历史上曾经出现过、今天也容易产生的一些错误认识，把知识掌握得更加扎实和牢固。

能够从知识中吸取思想启示

化学教学的任务，不仅在于传授化学理论知识和实验技术，而且还在于向学生揭示并吸取渗透于知识中的科学思想，使他们能够正确认识和对待诸如主观和客观、理论和实践、人类和自然、个人和社会等一系列根本问题。所以，教学，就“不应该教成一堆技术，而应该教成思想概念的诗句”①。

化学的历史，不仅是化学发展事件的记录，也是化学科学思想演变的再现。在化学教学中联系化学的历史，就有助于从化学知识讲授中获得的思想启示。比如讲到氧的性质和燃烧的概念，联系历史，就会使学生从中受到许多思想教益。

当时，在1774年，英国化学家普利斯特列本来发现的是能够使化学发生一场革命的氧元素，但是由于他受到了陈旧燃素说的思想束缚，硬把新发现的事实套入到旧理论的框框之中，主观地以为是发现了什么“脱燃素空气”，因而也就“在真理碰到鼻尖上的时候还是没有得到真理”②。不仅如此，甚至在燃素说已被推翻达二十多年之久以后，他还是在顽固地否认科学事实，坚持错误不放。1800年，在他逝世的前三年给友人的一封信中还表示，“我所主张的燃素说绝无弊谬，纵成孤立之势，亦决不畏失败，坚持到底。”结果是白白浪费了许多宝贵的时间和精力。

相反，同时代的法国化学家拉瓦锡，却不迷信权威和教条。他的座右铭是：“不靠猜想，而要根据事实”，强调“一切都要从事实出发来讲话”。他对于即使是极有声望的前辈化学家如波义耳和斯塔尔等人所做过的实验和得出的结论，也都不肯轻易相信，而要自己动手重新鉴定。为了搞清燃烧过程，他不顾统治化学百年来的传统看法，亲自

---

① 《世界科学译刊》，1979年第2期，24页。

② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，212页。

做了许多精密的定量实验，从而发现金属燃烧后所增加的重量，完全是来自于空气中的氧，而与所谓“燃素”无关，进而推翻了燃素说，实现了化学上的一场深刻革命。

这样，就能使学生从普利斯特利的失败和拉瓦锡的成功之中认识到，正确的科学的思想，对于科学发现来说是何等的重要。人们只有在正确思想的指导下，才有可能找到科学真理，取得成功。

可以培养学生掌握科学方法

现代的化学教学，强调要开发和提高学生的化学智力，而不是单纯的传授知识；要培养学生的观察力、想像力、思维力和创造才能等科学智慧或科学方法，而不是单纯的贮存知识，成为消极地接受信息的“容器”。科学方法，是人们发现真理和改造自然的桥梁和手段。在教学中对于科学方法的培养，随着现代科学的迅猛发展和知识与信息急剧增加的形势，必将越来越显得重要。一些“未来学”家曾经预测，未来的文盲，将不再是目不识丁的人，而是未能掌握科学方法和不善于解决问题的人。

化学的历史，实际上也是一部化学研究方法或化学智慧的历史。因此，结合化学的历史进行化学教学，就“不仅可以学到作为知识活动结果的知识结论，而且可以学到反映在认识活动过程中的研究方法，从而学到运用知识和发展知识的方法。”① 比如，讲到原子分子学说，就可以结合它的确立过程，学习其中的科学抽象的方法。

1803年，当道尔顿提出科学的原子论时，做为一种微观粒子的原子，还不能用直接观察的方法加以证实。正如道尔顿本人所说，因为“它们可能太小了（从当时看来）就是在显微镜得到改进时也不能被人看见”②。但是，在这种条件下，道尔顿为什么能够确认原子的存在，并且还就原子的不同类型、质量、性质等方面提出了科学的论断，就是由于他能够在大量实验的基础上，充分发挥了科学的想象力和理论思维的作用，有效地运用了科学抽象的方法：即透过现象、深入里层，抽取事物本质的方法。正是依靠它，才发现了隐藏在现象背后的原子，找到了化学反应的内部联系，并对复杂纷纭的化学现象作出了统一的说明。

阿佛加德罗分子假说的提出也是如此。分子虽然是比原子大一个层次的微观粒子，但是它比原子的存在，似乎具有更大的隐蔽性。因为从当时的化学经验来看，由相同原子复合成分子的可能性是不存在的。因此，如果不用科学抽象的方法去揭示掩盖在大量实验现象后的本质，分子假说也是不可能提出来的。

从这段历史中还可以看出，经验主义的“研究方法”是不适用了。因为它只承认现象的或经验的东西，不相信事物的抽象本质的存在，以致使当时的一些化学家竟怀疑和否定原子的真实性。著名的化学家杜马（J.B.A.Dumas，法国，1800—1884）就曾经说过：“如果由我当家做主，我便从科学中把‘原子’二字铲除干净，因为我确信它是在我们经验之外的。而在化学中我们从来就不应该远离经验。”③

这种研究方法的错误，恩格斯指出，是由于“经验竭力要自己禁绝思维，正因为如

---

① 龚育之：《关于自然科学发展规律的几个问题》，上海人民出版社，1978年，94页。
② 道尔顿：《原子论著作选集》，俄文版，1940年，93页。
③ 《十九世纪欧洲思想史》第一篇，上册，43页。

此，它不仅是错误地思维着，而且也不能忠实地跟着事实走或者只是忠实地叙述事实，结果就变成和实际经验相反的东西”了①。这是人们在科学研究中应当引以为戒的。

总之，化学教学同化学历史的结合，是具有重要意义的。在化学教学中克服忽视历史的偏向，加强化学教学同化学历史的结合，就是进行化学教学改革的一个重要方面，因而也是提高化学教学质量的一项有效措施。

廖 正 衡

4.化学史研究的方法问题

如何研究化学史，怎样从大量化学史实的搜集、整理和分析中去编写化学史，揭示化学发展的规律，并给人以有益的启示和借鉴，从而推动化学科学的发展，这是研究化学史所必须考虑的一些原则问题。半个多世纪以来，国际学术界曾经进行过长期探索和争论，然而至今仍未获解决，而且在某些问题上甚至比以前还“更加模糊不清”②了。对此，我们也应当给予应有的注意，并提出自己的看法。

三 种 不 同 的 观 点

对于化学史的研究，目前国际上主要是存在着所谓传统论、内在论和外在论等三种不同的观点③。

（1）传统论。它认为，研究化学史主要是对已经考证过的大量史料加以搜集和整理，并使之系统化，以说明究竟是在什么时候、由什么人、发现了什么新的化学事实，或建立了什么新的化学定律和理论，主要是依照年代来系统叙述化学科学的成就。从方法上来看，可以说只是一种“搜集材料”或“记录式”的研究法。库恩（Kuhn）说，这一类的书其实主要就是搜集材料的技巧④。其中最典型的可以说就是由柏廷顿所写的大部头的《化学史》⑤和由埃德（Ihde）所写的《现代化学的进展》⑥。

对于这一类传统式的化学史著作，人们大多是比较熟悉的。但是究竟应当怎样给予评价，却往往考虑不多。1966年，化学史家泰克瑞（Thackray）在他所提出的《历史的化学》一文中，首先对这种传统的化学史及其研究方法提出了质疑。他认为，这种古老的研究方法，主要是仅限于对史料的归纳，忽视了同哲学的关系，是一种应当淘汰的方法。他尖刻地批判说：“这种陈腐的孤立的研究化学史的流派应当寿终正寝了，而柏廷顿的著作可能就是为此而写的‘追悼词’吧！”⑦

（2）内在论。它认为，研究化学史主要是研究化学发展内部固有的“内在理性”或内在的思维活动，并依照这种“内在的思维逻辑来理解”⑧化学的历史，而不是简单

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，96页。
② 《科学史译丛》，中国科学院自然科学史所，1983年第1期，61页。
③ 《化学史研究》，日本国化学史研究会，1974年第1期，2—10页。
④ T.S.库恩：《科学革命的结构》，上海科技出版社，1980年，1页。
⑤ J. Partington, *History of Chemistry*, London (1964).
⑥ A. J. Ihde, *The Development of Modern Chemistry*, London (1964).
⑦ A. Thackray, *The Chemistry of History*, *History of Science*, 5, 124 (1966).
⑧ 《化学史研究》，日本国化学史研究会，1983年第1期，8页。

地依靠化学史实的积累和记录，也不是依靠化学和科学以外的外部因素的影响。它把化学史只是归结为这种内在思维的所谓独立延续运动。企图用化学自身内在的逻辑来解释全部化学知识运动的规律性。对于外部因素的影响，它认为那只是偶然的、无关紧要的，或者只承认外部因素能促进或阻碍化学的发展，而不能影响化学的知识结构、内容和发展方向。所以，从方法论上看，它可以称之为是所谓“内在编史法”（internal historiography），而由它所编出的化学史也就叫做化学内在史或所谓化学智慧史（intellctual history of chemistry）。

这种内在论的观点，从科学史的研究上看，最早是来自于法国科学史家科瑞（Koyre）。他在1939年发表了一篇著名的论文《伽里略研究》，就提出了这种看法。他认为，科学，作为精神活动，同样地也只能从科学本身去加以解释①。此后内在论的学派日盛，影响渐大，以致在最近几十年来西方大多数的科学史论文，都留下了这种观点的印记。

（3）外在论。它认为，化学科学的发展仅仅应直接归因存在于化学和整个科学之外的外部因素，特别是社会精神生活、社会政治和社会经济等因素的作用，而不取决于化学科学内部的思维逻辑。内部因素的影响是微不足道的，依靠它往往不能解释化学发展伟大变化或转折的原因。这种外在论的观点，从方法论上看就是所谓“外在编史法”（external historiography）。

在科学史研究中这种观点的代表作，可以说是1931年在伦敦召开的第二次国际科学史和技术史大会上，由海森（Hessen）所作的《牛顿原理的社会和经济根源》②的论文报告。它引起了与会者的重视，甚至是“产生了爆炸性的影响”，促进了不少科学史家开始注意于社会因素对科学发展影响的研究。

那么，究竟应当怎样研究化学史，是依照传统论、内在论还是外在论？这是需要我们进一步加以研究的。

不应从中做出简单的抉择

研究化学史，无论是对于传统论、内在论或外在论，都不应从某一学派的狭隘观点出发，或完全赞成此，或完全否定彼，做出简单的抉择。当然也不能像某些人所主张的那样，认为根本就“没有科学方法这种东西”，“要遵守的唯一原则是：怎么都行。”③

正确的态度应当是对每一种方法都要加以分析和研究，扬其长，弃其短，并逐步摸索出一套比较切合实际的研究方法，以更自觉地从事化学史的研究。

到底应当怎样认识这些不同学派的观点呢？

第一，对于传统论，及其所撰写出的编年史式的化学史著作，是不应当完全否定的。化学史研究的根本任务就在于，通过对过去化学发展的线索来揭示化学发展的规律，并指导现实化学的研究，以促进化学的进步。因此，化学史研究的基础，首先就应当是对过去化学面貌的忠实再现或复原；做为第一步，就应当是去广泛地搜集、整理和

---

① 《科学史译丛》，中国科学院自然科学史所，1981年第1期，11页。

② B. Hessen, *The Social Economic Roots of Newton's Principia*, London (1931).

③ 《自然科学哲学问题丛刊》，中国社会科学院，1981年第2期，14页。

分析大量的化学史料，并系统地加以记录，具体叙述过去化学的成就及其过程。这项任务不仅具有重要意义，而且也是极其复杂和艰巨的。正如著名科学史家米库林斯基所说，科学本身的研究工作“好像是脚手架，一旦房屋盖好，便行拆除”，因而对于它所取得的成就，则“很少会留下创作过程的痕迹，即科学家所走过道路的痕迹。”[①] 为此，就需要化学史家把分散、凌乱和浩瀚的化学史料加以集中和归纳，从中去做出自己的积极贡献。总之，这就是说，传统的观点还是有合理之处的，而由它所编写出的传统类型的化学史著作，更是有必要存在。因此更不能说是已经到了“寿终正寝”的时候了。

但是，如果把化学史的研究和叙述，仅仅局限于是对化学史料的搜集、整理和记录，还是远为不够的，还是远没有完成化学史研究所担负的主要任务。应当看到，单单记录事实，并不是研究的最终目的，而仅只是揭示化学发展规律的一种手段。如果是仅止于此的话，那么化学史的研究成果也就只能是千篇一律的罗列知识的货摊，化学史的研究也就会浅尝辄止，会永远停留在肤浅表面现象的堆积上。这不能不说是传统论所易于出现的弊病和缺陷。

第二，对于内在论，应当看到，的确也并不无合理的因素。因为化学的发展也是一种人类的认识现象。化学中的概念或理论都是客观自然界物质的化学运动规律在人们头脑中的反映。因此，在化学发展中就必然存在着化学概念或理论的交替和演化的循序性、规律性，即化学所特有的内在思维运动规律或内在思维逻辑。它们并不同外在的社会因素直接关联，而是由化学的内在矛盾直接支配的。诸如化学实验和化学理论的矛盾（如有机物取代反应的实际同当时流行的二元学的矛盾，从而导致建立了有机结构理论），不同学说或理论的争论（如关于化合物有无固定组成的争论，提供了近代原子论诞生的条件），不同学科之间的相互渗透（如无机化学和有机化学的相互渗透，产生了元素有机化学等新学科），化学继承和化学革命的更替（如氧化说继承了燃素说的成果又推翻了燃素说，实现了一场化学革命），等等。显然，探讨这些内在因素并揭示化学的内在思维的演化规律，对于深入认识和把握化学发展的规律性是很为必要的。

但是，这种理论却把化学的内在思维的演化，看成是可以完全脱离于社会而绝对独立存在的，视外部因素为无足轻重或不能影响内在思维的演化，则又是片面的。实际上，化学的发展，既是人类的一种认识现象，也是一种社会现象。社会的需要，无疑是化学发展中的一种强有力的推动因素，例如社会上需要开发原子能源，则推动化学发展了超铀元素化学等研究；需要改革化学固氮的工艺，则促进了模拟生物固氮的研究，并发展了金属络合物理论，等等。此外，社会生产又是化学发展的物质基础，例如它所提供的现代化测试工具诸如电子探针、扫描电镜、四圆衍射仪等，则为现代化学发展的进一步微观化、定量化和理论化提供了重要条件。不仅如此，社会因素还会通过各种渠道影响着化学家头脑中的概念或理论框架的图像。例如化学家凯库勒由于受到建筑学教育的社会因素的影响，使他构思和提出了苯的经典结构式，并影响到后来的经典结构理论的模式，等等。可以看出，社会因素可以通过物质和思想两个途径作用于化学发展的内在因素，进而影响到化学知识的结构、内容和发展方向，并使化学发展呈现出错综复杂和

① 《科学史译丛》，中国科学院自然科学史所，1981年第1期，11页。

丰富多采的景像。因此，内在论所主张的内在思维的完全独立性是并不存在的。如果依照它的观点研究化学的历史，就会把化学的发展同周围的社会环境完全隔裂开来而仅仅局限在“纯粹”的思想范围之内，成为一个与世隔绝的“孤岛”。这是不可能真正认识和把握化学发展规律的。

尽管如此，内在论也还不算是一棵完全不能结实的花。它的观点毕竟引起了人们对于化学理论的交替和化学概念的演变等内部思维规律研究的重视，从而把化学史的研究由表及里地导向深入。同传统论相比，不能不说是一个很大的进步。但是它的封闭、孤立研究的形而上学观点则是需要加以剔除的。

第三，对于外在论，也是有相当的可取之处。它把化学和科学的发展都看成是复杂社会现象的一部分，都置于社会背景中去加以考察，探讨科学发展与社会经济之间的联系，寻求化学发展的根本动力和起因，强调社会经济因素的决定性作用，显然都有助于认识化学发展的规律。恩格斯曾经指出，“科学的发生和发展一开始就是由生产决定的”[①]。所以，从这一点看，外在论的观点却也在一些地方可以同唯物史观相吻合。实际上，外因论正是西方科学史学家在受到了马克思主义的影响下形成的，只不过是还没有真正理解好马克思主义。

外因论的最大问题是，忽视了化学科学作为思维活动的特点。他们否认科学思想的绝对“独立延续性”是正确的，但是却又进而否定了科学思想的相对独立性，抹杀了化学思维的积极的能动作用。它认为化学的发展是社会政治和经济变化的直接反映，而无需通过中介，在二者之间存在着一种机械的简单的因果关系。例如苏联著名化学家凯德洛夫（Кедров）提到，“化学中的剧烈改革伴随着社会大变革。例如医化学阶段的开端与宗教改革的开始相巧合，燃素论的崩溃与1789年的第一次法国革命巧合，贝采里乌斯学派（二元说）的垮台几乎完全与1848年的革命同时”，等等。由此他认为，“社会制度的更替、旧制度的崩溃及新制度的产生，都合乎规律地引起了自然科学状况的根本变化，及其发展中的新时代和新阶段的出现”，从而得出了化学发展是“首先取决于阶级斗争的历史”的结论[②]。这种认为具有直接性必然联系的观点，初看起来似乎很有道理，很合乎“规律性”，然而却经不住进一步的推敲。因为如果说是法国大革命直接导致了燃素说的崩溃，那么为什么并未在同时也导致同燃素说属于同一类型的物理学上热素说的崩溃呢？大家知道，热素说只是在约50年以后由于能量守恒定律的发现才被最后推翻的。还有，1848年的欧洲革命实际上并未使欧洲各国的封建秩序崩溃，那又为什么会使二元说垮台呢？此外，如果这种理论能够成立的话，它也无法说明十九世纪六十年代元素周期律的发现和化学结构理论的建立，究竟是同什么样的社会大革命相联系的，无法说明十九世纪末由于元素放射性和电子的发现所导致的元素观和原子观的变革，到底是同哪一种社会变革直接关联的，等等。可以看出，这种企图在社会发展和化学演化之间建立如此牵强附会联系的观点，实际上是把社会因素的重要作用简单化了，并曲解了化学发展的规律性。依照这种观点研究化学史，或者只能得出一些失去化学思维特征的

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，162页。

② Б.М. Кедров, *Трисовешания по история естваознания*, 24—26, Декаъря 1946 г., Изд-во АН СССР стр.26 (1948).

空泛的结论，或者不恰当地把政治观点和化学研究混为一谈，出现象五十年代批判鲍林“共振论”和英果尔德（Ingold）“中介论”等一类的错误倾向，不利于化学的发展。外在论，实质上是把化学仅仅缩小到一种社会经济或政治的附带现象，是一种机械唯物史观的表现。

应当建立一种“综合论”的观点

实践表明，化学的发展总是由内在因素和外在因素等两个方面综合作用的结果，并且外在因素总是通过内在因素才发挥作用的，而不是简单地直接影响着化学的发展。例如，在二十世纪初爆发的第一次世界大战，由于对炸药的急骤需求，无疑是极大地促进了哈伯（Haber）法合成氨的成熟和发展。但是，应当看到，这只有在化学内部已经建立了化学平衡移动原理（1884年）和催化剂概念（1895年）等理论的基础上才可能实现的。因此，并不是任何一次战争或社会动荡都能有哈伯法合成氨的发展，而只有在化学内部已经具有了充分依据的情况下，并在受到第一次世界大战等外在因素的作用时才可能实现。可以看出，人们只有在全面和系统地搜集、整理化学史料的基础上，以内在因素和外在因素相结合的观点，并处理好二者的关系，才能正确地研究化学的历史，揭示出化学发展的规律性。这就是说，应当建立一种“综合论”的观点。它既汲取了传统论、内在论和外在论中的合理因素，又不同于这三种理论。这种综合论的观点，如果稍加补充和具体化，可以归结为以下几项化学史的研究原则。

关于化学史和科学史的研究原则，国际学术界已做过一些论述，特别是在1971年第十三次国际科学史和技术史大会上，著名科学史家凯德洛夫还专门做了《科学史及其原则》的报告，提出了所谓历史主义、展望性、决定性、整体性和多层次性等五项原则[①]，受到了广泛重视。但是这些原则似有一般化的倾向。因此，还需要基于我们自己的情况和认识，明确出一些更切实际和具体的研究原则，以促进化学史研究的开展。这里，笔者仅拟提出一些极不成熟的粗浅认识，供大家参考。

（1）规律性原则。这是指要承认化学发展存在着固有的客观规律，并应依此来研究化学史，以揭示和表明这种规律性。相反，不能像一些人所认为的那样，似乎“科学没有规律性”，“科学本质是无政府的事业”，“科学的发展比任何科学方法所能想像的不整齐、混乱、非理性得多”[②]，从而否认化学发展的规律性。如果真的是这样的话，那么，化学史的研究也就真的会变成了一个凌乱无序和陈旧知识的杂货摊了，也就会把化学史的研究引到邪路上去。

著名化学家肖莱马（Schörlemmer）早在十九世纪时就曾说过，“化学的发展是按辩证法的规律进行的”[③]。揭示这种规律，可以像著名化学家奥斯特瓦尔德（Ostwald）所说的，要注意“经常地和同样地在许多个别现象中反复出现的那种东西”[④]，寻找在化学概念、理论和方法的演化中所经常出现的相对不变因素，以及它同人物和社会等各方面作用的因果联系，等等。

---

① 《科学史译丛》，中国科学院自然科学史所，1980年第1期，16页。
② 《自然科学哲学问题丛刊》，中国社会科学院，1980年第2期，4页。
③ 潘吉星：《革命化学家肖莱马》，科学出版社，1978年，93页。
④ 奥斯特瓦尔德：《电化学史》，彼得堡1911年版，8页。

（2）记事性原则。就是应当把化学发展中所取得的主要科学成就，尽可能地按事、按时、按地和按人地加以系统记录，并叙述它的形成过程，由此来客观地再现或复原过去化学的面貌，为进一步的研究提供比较系统和完整的史实基础。这样做，虽然只是叙述性的记事，尚未能深入揭示出化学发展的内在规律，但都是研究化学史所应当迈出的必要一步。

诚然，正如库恩所说，在化学发展中确有一些科学发现（比如氧的发现），有时很难或不能确定出究竟是在何时何地由哪个人首先完成的，找不出一个精确的“时空座标”。但是，即使是如此，也不应当是像库恩所说的那样，依照“何时何地何人何事”的问题来记事的提法本身，就是“一种从根本上说来是不恰当的认识”①。因为就大多数的科学发现来说，还是可以或大致可以确定出这种“时空座标”的，对于少数一时不能确定到底是由哪个人首先完成的科学发现，也还总可以大致确定出有关的几个人。所以，坚持记事性的原则，不仅是必要的，也是可能的，不能认为是一种“根本”“不恰当”的认识。

在记事的过程中，应当坚持运用辩证唯物主义的历史观点，“能够始终站在现实的历史的基础上，不是从观念出发来解释实践，而是从物质实践出发来解释观念的东西。”②要忠实于历史事实，具有一个客观的和严肃的科学态度，全面和系统地搜集、整理和记录化学史实，而不能依照某种主观上的需要去任意地歪曲事实或篡改历史。应当实事求是，秉笔直书。应当说，这是研究化学史的一个根本前提和基础。

（3）外观性原则。也就是应当从化学和整个科学以外的社会因素特别是生产实践的因素，来观察、分析和认识化学发展的历史。因为，化学发展是整个社会发展的一个组成部分，是不能脱离社会因素的影响而孤立存在的。因此，研究化学史，就应当跳出化学科学的狭隘视野，从社会整体的高度之上去考察，否则就不可能真正揭示出化学发展的规律。

从外部考察化学的发展，就应当研究各种有助于和有碍于化学发展的各种社会条件，诸如生产实践的需要，社会革命的性质，社会制度的优劣及科学活动的组织和化学人物的状况等等因素的影响；注意分析社会思想与化学思想之间，哲学观点与化学思维之间的联系与交织；认识化学起源的社会原因和化学发展的根本动力，以及如何通过化学的内在因素推动化学的发展，以全面揭示化学发展的规律。化学史和科学史的研究，从二十世纪中叶以后已经越来越具有社会史的性质了，以至逐渐出现了专门的所谓“科学的社会史”的研究。

（4）内观性原则。这是说要从科学和化学内部的化学理论的演变或化学思维的逻辑，来观察、分析和认识化学的发展，揭示其内在的固有的规律性。

辩证唯物史观认为，考察科学的发展，不仅要注意外部社会实践的决定性作用，而且还要认识到科学内部思维活动的相对独立性和主动性，也就是说，不仅要从外部，而且也要从科学内部去加以研究，以此来深入认识化学发展的本质。

从内部研究化学的发展，就应当了解化学理论形成的原因与条件，过程与实质，交

① 《自然科学哲学问题丛刊》，中国社会科学院，1981年第2期，7页。
② 《马克思恩格斯全集》第3卷，人民出版社，1972年，43页。

替与演化，研究化学概念，假说、定律等一系列具体知识结构变化的规律性。特别是应当结合外在的社会因素的条件来揭示背后的化学思维的逻辑，即化学思想的变化规律。著名历史学家卡尔（Carr）说："一切历史都是思想史"①。化学的历史也不例外。化学史，可以说就是一出不会演完的化学"思想剧"。

（5）哲观性原则。就是要用马克思主义哲学来指导化学史的研究，以观察、分析、认识化学的发展，否则就不能认识和掌握化学发展的辩证规律性。"科学史表明，辩证方法是真正科学的方法"②，辩证唯物的历史观，"是唯一的科学的历史观"③。因此，我们不能迁就西方实证主义者们的看法，认为哲学不过是"无意义的胡说"，而声言要把哲学"从科学中驱逐出去"④。相反，我们应当坚持贯彻哲观性的原则。科学哲学家拉卡托斯（Lakatos）曾经说过，"没有科学史的科学哲学是空洞的；没有科学哲学的科学史是盲目的"⑤，这句话说得还是有些道理的，问题是科学哲学应是马克思主义的。

运用马克思主义哲学原理来研究化学史，就应当客观地分析化学的史实，历史主义地评价化学成果和化学人物，并从内部和外部、物质和思想之间的相互联系和相互作用等各方面加以全面考察，用运动、变化、发展的观点去认识化学发展的全过程。当然，这样做，并不是要把化学史或科学史同哲学混为一谈，或者像库恩所说的那样，是单纯地"为哲学而写的历史"。这是自不待言的了。

（6）人物性原则。是指要注意研究化学家在化学发展中的影响和作用，分析他们在学习、工作、生活、思想和方法等各方面的状况，进一步了解化学思想的形成与演变的规律。

十九世纪著名化学家凯库勒有过一句名言："化学史就是化学家的历史"。这句话虽然并不一定很全面，但也说出了一定的道理。因为化学的历史就是以一个个化学家为代表的人民群众所创造出来的，化学的发展是同化学人物的活动密切相关的。可见，在化学史研究中充分反映化学人物的贡献、作用和他们的思想活动，并不就会像米库林斯基所说的那样，是一种有问题的、落后的所谓"按人头"的编史法，或者就意味着是把化学发展看成了是"偶然性占统治地位的过程"⑥。日本著名化学史家山冈望的侧重反映化学人物的名著《化学史传》，在出版发行了五十多年以后，至今仍然能够经久而不衰，受到读者的欢迎，就是一个证明。

在化学史研究中分析化学人物，尤其要注意揭示他们的科学创造精神和科学发现的心理活动，总结他们的思想方法和研究方法，包括他们已经用过的和应该使用的方法，特别是不仅要了解他们成功的经验，还要吸取他们失败的教训。正如杰出的物理学家麦克斯韦（Maxwell）所说："科学史家不能局限于列举研究成果"，还"应该告诉我们失败的探索，并解决为什么某些有才能的科学家没有能找到认识的钥匙"⑦。

---

① E.H.卡尔：《历史是什么？》，商务印书馆，1981年，19页。
② 《斯大林全集》第1卷，人民出版社，277页。
③ 《列宁选集》第1卷，人民出版社，10页。
④ 《自然科学哲学问题丛刊》，中国社会科学院，1980年第4期，1页。
⑤ 《自然科学哲学问题丛刊》，中国社会科学院，1980年第2期，96页。
⑥ 《科学史译丛》，中国科学院自然科学史所，1981年第1期，24—32页。
⑦ 同⑥，26页。

（7）现实性原则。就是要通过研究化学的过去，认识化学的现在和未来，使化学的历史为化学的现实服务。这也是研究化学史的一个根本目的。鲁迅先生说得好，“我们看历史”，也就是“能够据过去以推知未来”①。所以，研究过去不是目的，只是为达到服务于现实目的的一种有效的手段。不能为历史而历史。正如科学哲学家波普（Popper）所说，研究过去，就可以“同各种历史人物展开争论，看看他们对于我们面临的问题是怎样想的、怎样说的、怎样解决的，以便从中寻找某种科学发现的逻辑。”②

这样，研究过去的化学史实，就应当注意去挖掘过去史实背后的一些能够为现今人们可以借鉴的东西，诸如在人们的世界观、哲学思想、科学思想、研究方法以及科学组织与管理等方面的启示，以指导现实的化学研究，并预测未来化学的发展。由此就可以不断地把“过去”转化为“现实”，把精神转化为物质，使化学更好地为社会服务。

（8）重整性原则。是对于已经研究过的化学发展过程，随着科学的进步和新史料的发现，还应当不断地再次加以考察和分析，进行补充、修正、重新评价和整理。这就是说，人们对于化学发展规律的认识，只能是逐步深入的，不能一劳永逸，永远停留在一个水平上，历史学家卡尔说，应当“把历史当作一个不断前进的过程，历史学家则在这过程中随之前进”③。这样，人们就会不断提高认识，就需要不断重整历史。否则，也就会封闭了不断深入认识化学发展规律的前进道路。

应当看到，这样做，并不意味着是化学历史研究的相对主义，或是给历史的结论做周期性的翻案。实际上，这只是人们对于化学发展规律认识的相对与绝对辩证统一关系的一种表现。总之，正像科学史家维尔纳德斯基所说，“科学在前进，它不仅创新，而且不可避免地要重新评价旧的过时的东西。”④

关于原则，恩格斯说过一段很精辟的话，他指出：“原则不是研究的出发点，而是它的最终结果；这些原则不是被应用于自然界和人类历史，而是从它们中抽象出来的；不是自然界和人类去适应原则，而是原则只有在适合于自然界和历史的情况下才是正确的。”⑤这里提到的一些原则，究竟是否能真正适合于化学历史的情况，还有待于实践的检验。

廖　正　衡

（二）化学发展的阶段性

1. 化学发展分期的尝试

如何对化学的发展阶段进行划分，是人们研究化学的历史，掌握化学发展规律的一个首要问题。目前，化学史家对化学发展的分期提出了许多不同的划分方法。然而似乎还不够理想。这里拟针对当前化学发展分期存在的问题，尝试提出一个化学发展历史的

---

① 鲁迅：《华盖集·答KS君》（一九二五年八月二十日）。
② 《自然科学哲学问题丛刊》，中国社会科学院，1980年第3期，1页。
③ E.H.卡尔：《历史是什么？》，商务印书馆，1981年，1页。
④ 《B.И.维尔纳德斯基论文集》，彼得堡，1922年，51页。
⑤ 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，32页。

分期体系，供同志们参考。

化学发展分期的现状和问题

当前关于化学发展所作的分期大致有以下五种类型：

（1）按年代分期。这种分期法是依照年代把化学的发展分为古代、中古、近代、现代等几个阶段，或依照一个世纪或几个世纪为阶段来划分为更多的阶段。这种分期实质上是以事物发生时间的先后顺序为标准的分期，是一种在科学通史和学科分史中最常见的一般的分期法。但是，显然它并未能反映出化学发展自身的内在的特殊性质。

（2）按人物分期。比如把化学的发展分为帕拉塞尔士时期、波义耳时期、拉瓦锡时期、道尔顿时期、贝齐利乌斯时期等等，是以一些重要化学人物出现的顺序为标准的划分法。这显然难以显示化学发展的固有规律性。因为化学史主要是由化学概念和理论的演化体现的，而不是化学家的交替史。

（3）按社会经济形态分期。比如苏联的凯德洛夫把化学史分为奴隶社会化学、封建社会化学、资本主义社会化学和社会主义社会化学等四个时期[1]。这种分期单纯注重了化学发展同生产、经济和整个社会之间的统一和联系，而忽略了化学发展的自身特点。事实上，应当是在肯定任何科学的发生和发展一开始就由生产决定的同时，也绝不能忽视化学科学所具有的相对独立性和有别于生产、经济和社会所固有的特殊的质的规定性。

（4）按思维的发展阶段分期。比如凯德洛夫在《论自然科学史分期原则》一文中提出的朴素辩证法时期、形而上学时期和唯物辩证法时期[2]。还有以归纳方法、演绎方法的产生和形成为标准进行的分期等等[3]。实质上这是一种哲学史的分期。诚然，哲学同化学的发展是有着密切联系的，但是哲学思想同化学思想相比，具有更深刻、更普遍和更抽象的性质，哲学史并不等于是化学史。所以，这种分期法也不能直接反映出化学发展的固有特征。

（5）按重大理论发生的顺序分期。比如划分为炼金术时期、医药化学时期、原子分子论时期和元素周期律时期等等。这种分期法是在化学史著作中经常见到的。它较之用“年头”和“人头”作为化学史分期标准是一个深人。如果说按“年代”和“人头”分期是认识的现象阶段的话，那么它就可以视为是认识的一级本质阶段。然而它也还未能从更深一层的本质上反映出化学发展的特点，概括性还不够强。人们难以更好地认识和把握化学发展的规律性。

针对以上几种分期的情况和问题，作为一种新的尝试，我们提出一个以对作为化学研究对象的化学物质的认识进程为标准的分期法，具体是把化学的发展划分为以下三个时期：（1）认识物质的性质时期；（2）认识物质的组成时期；（3）认识物质的结构时期。

新的化学发展分期体系

（1）认识物质的性质时期

① 〔苏〕沙赫巴拉诺夫：《化学哲学问题纲要》，科学出版社，1960年，28页。
② Вопрос философии，1，стр. 365 (1950)，БСЭ，Ⅱ изд，15，стр.549。
③ 同①，23页。

这一时期是从古代化学萌芽时期开始，直到十七世纪中叶以前的一段漫长的发展时期，前后经历了原始社会、奴隶社会和封建社会等三个社会发展阶段。该期人们主要是通过生产和生活等实践活动，直观地获得了许多有关物质性质的知识。这一时期人们虽然从事了古代化学工艺、炼金术、医疗化学和冶金化学等多方面的化学实践活动，然而从人们对物质认识的深度上看，却仍然只是停留在认识表面性质的阶段。在古代化学工艺中，人们也只是认识到了粘土可以烧成陶瓷，矿石可以炼出金属，木柴燃烧可以化为灰烬，粮食能够酿制变成美酒，等等，认识到了粘土与陶瓷、矿石与金属、木柴与灰烬、粮食与美酒之间的性质的差别及其转变的规律，但是对于它们的内部组成以至结构则尚一无所知，诚然，当时也提出了“五行说”“四元素说”、“原子论”和“端”说等关于物质组成和结构的一些看法，然而也只是一些带有主观臆测性质的猜想，并没有科学的依据，还谈不上是一种科学的认识。因此，还不足以代表这一时期人们对于物质认识的程度，还不能做为化学分期的标志。至于后来出现的炼金术，虽然经历了千余年的化学实践，认识了许多元素和化合物，掌握了一些化学变化规律，比如知道了“丹砂烧之成水银，积变，又还成丹粉”等化学反应，但也还只是就物质的性质来认识物质的，仍处于知其然而不知其所以然的阶段，而并未深入到对于物质的组成和结构的认识阶段。更晚期出现的医药化学和冶金化学的情况，也大致如此。这样，如果我们把直到十七世纪中叶以前的古代化学概括为“认识物质的性质”的阶段，也许更能深刻地反映出化学发展的内在本质，更便于人们去认识化学发展史的脉络，掌握化学发展的规律。

（2）认识物质的组成时期

这一时期大约是从十七世纪中叶开始直到十九世纪中叶的200多年的期间。这正是资本主义社会发展时期。这一时期的化学已经开始从炼金术的桎梏中解放出来，走上了科学发展之路，直至近代化学科学体系的形成。其间化学的发展取得了一系列重大理论成果，诸如元素的科学概念的提出，氧化学说的革命，原子分子论的建立，元素周期律的发现，等等。这些重大成就标志着化学对物质的认识，已经从表面性质的认识阶段，深入到了内在组成的阶段。

我们可以看到，波义耳关于元素的科学概念的提出，使化学开始能够科学地了解物质组成中“质”的因素，因而就在认识物质的组成方面迈出了关键的一步。此后，氧化学说所实现的革命的一个重要方面，也是科学地分析了燃烧产物的组成，认识到它并不是脱除燃素后剩下的“残渣”，而是物质同氧结合而组成的氧化物。从这个方面说，氧化学说的革命则是对物质组成认识的又一个重大进展。再后，原子分子论的建立，则不仅使化学从原子水平上认识到了元素的本质，从而进一步认识了物质组成中的“质”的因素；而且还从原子量和原子数目的水平上，比较精确地认识到了物质组成的“量”的因素。这就把化学对于物质组成的认识提到了一个比较全面的、定量的、精确的新高度。最后，元素周期律的发现，则把物质组成的“质”与“量”的因素辩证地统一起来，并加以系统化和规律化了，从而再把化学对于物质组成的认识提到了空前的水平。因此，统观自波义耳以后直到门捷列夫元素周期律发现后这200多年的化学发展过程，从化学发展的内在特点来看，简而言之，可以说主要就是对物质组成认识上的由浅而深、由定性到定量的发展过程。因此也就自然地可以把它概括为“认识物质的组成时期”。

（3）认识物质的结构时期

这一时期大约是从十九世纪中叶开始，直到目前现代化学发展的百余年期间，是化学开始准备并逐渐跨人了现代发展阶段的时期。它从经过弗兰克兰、凯库勒和布特列洛夫等所初步建立的有机结构理论开始，建立了原子的结构理论、分子的量子化学理论和分子轨道对称守恒原理等具有里程碑性质的主要化学理论。这标志了化学对物质的认识深度已经从表面的性质、内在的组成深入到了内在的结构的本质阶段。

可以看出，有机结构理论的建立，开始告诉人们物质分子的本性，不仅取决于作为组合单元的元素的本性和组成原子的数量，而且也取决于原子的排列方式，即物质的化学结构。后来，荷兰化学家范霍夫又在分子平面结构的基础上提出了立体结构的概念，比较全面地反映了分子结构的真实情况，从而使化学进入到了认识物质结构的新阶段。二十世纪以后，化学借助于物理学的革命及其所建立的量子力学理论，揭示了作为分子结构单元的原子的结构，认识到其中的核外电子是以几率波的方式分布于原子空间的，这就为化学进一步认识分子的结构提供了理论基础。1927年由海特勒-伦敦所建立的量子化学及其随后人们所建立的现代价键理论、分子轨道理论和配位场理论等，则是使化学对于物质结构认识的进一步定量化、精确化和全面化。五十年代以后由福井谦一和霍夫曼所提出的前线轨道理论和分子轨道对称守恒原理，则使化学从研究分子的静态结构跨进到认识分子的动态结构的新阶段，以至从分子结构的角度能够说明和预测出一系列化学反应的方向和条件，构成了现代化学反应理论的重要理论基础，带动了无机化学、有机化学和物理化学等各门基础化学分支学科的发展。可以预见，在今后一段时期内，化学在解决宏观问题的同时，还必然要更多地注意微观现象，特别是注意运用原子结构、分子结构、分子轨道对称守恒原理、化学反应分子动力学等化学理论，进一步研究分子的静态结构和动态结构，以至生命物质的结构，认识分子微观的转化步骤和机理，判断反应是否“允许”或“禁阻”，预示产物的构型和性能，建立分子设计的理论和揭示生命现象的奥秘等等，这都还必然要在对物质结构的方面进行更为全面和深刻的探索，以便从结构的本质上揭示出物质的性能及其相互转化的规律性，以及揭示无生命和有生命物质间的转化机理。因此，从十九世纪中叶有机结构理论建立以后直到现代化学的诞生，以至未来的一段时期内，化学主要的理论成果都是围绕物质结构的课题而出现的。化学发展的主要特征，是在于研究和认识物质的结构，即从无机物的静态结构到动态结构以至到生命物质的结构等，从而也就可以把这一时期概括为“认识物质的结构时期”。

这种依照化学对于物质的由性质到组成到结构的认识程序，所建立起来的化学发展的新的分期体系，其间的转化界限固然不可能是截然分明的、绝对的，甚至还会错综复杂地交织在一起。然而每一个时期毕竟还会有一个比较主导的认识阶段。这样，依此去进行分期，也许就能够比较充分地体现了化学科学发展的相对独立性和特殊性，表现出内在的本质和自身发展的特点，便于人们追踪和认识化学发展的进程，掌握化学发展的规律性。当然，这种分期法并未能直接反映出社会因素对化学发展的影响，这不能不说是一个不足。然而任何一种分期方法也难免不无缺陷。问题在于它是否能更有助于认识化学的发展规律。从目前看来，我们的回答基本是肯定的，至少是可以作为对其它分类方法的一种重要补充。这也就是我们提出这种新分期尝试的主要想法。

杨纪奎　白婉华

2. 化学革命与突破初探

化学革命是科学革命的一部分。在化学发展史上，曾发生过几次革命和突破。每次化学革命和重大突破都极大地推动了化学的发展。什么是化学中的革命和突破，它们有什么特征，发生的原因是什么，有什么意义和作用？讨论这些问题，对于化学史和化学哲学的研究以及化学的发展都是有益的。

化 学 中 的 革 命

（1）化学革命的特征

什么是化学中的革命？基于对化学史的分析和一些文献对自然科学革命的论述[1]，可以说化学革命就是打破化学中原有的基本概念和理论以及与它们相联系的思维方式，建立新的基本概念和理论以及思维方式的过程。当化学发展到一定的历史阶段，由于新的实验事实同原有的化学理论之间出现了不可调和的矛盾而使化学发展产生“危机”时，就必须打破旧的理论体系，建立新的理论体系，抛弃旧的思维方式，建立新的思维方式。这种化学理论和思维方式的破旧立新过程就是化学革命。在化学发展史上，这样的化学革命可以认为有两次：一次是氧化说推翻燃素说，另一次是原子“不可分”理论的被推翻。

化学革命的主要特征是：

第一，打破化学的旧理论体系，建立新理论体系。例如由于氧的发现，拉瓦锡对燃烧现象作出了科学的解释，推翻了燃素说的旧理论体系，确立了以氧化学说为核心的化学新体系。这样，就把以燃素说的形式倒立着的全部化学理论颠倒了过来，解决了实验事实与理论的不可调和的矛盾，完成了化学上的一次伟大革命。又如，由于电子和元素放射性的发现，就直接证明了原子结构的复杂性，表明了原子的可分性和元素的可转化性。这一系列的惊人发现，就从根本上打破了从留基伯到道尔顿的两千多年来关于原子绝对不可分割和永远不变的传统观念，摧毁了旧的理论基础，导致了物理学以至化学的革命。

第二，抛弃旧的思维方式，建立新的思维方式。从认识论上看，化学革命是人们从一个认识阶段向另一个认识阶段的过渡。当旧的思维方式丧失了解决新的理论问题能力时，就妨碍了化学的发展而必须加以扬弃。比如直到十八世纪末，化学家们还认为燃烧是物体的分解。当时由于燃素说只能以形而上学的思维方式停留在对事物表面现象的认识上，因而不可能揭示出燃烧的本质。拉瓦锡则能通过对大量实验材料的概括、分析和研究，以精密的实践结果为依据，以透过现象深入本质的科学思维方式，把握了燃烧的本质。可见，化学革命也是化学家思维方法的急剧转变，是化学家扬弃旧的思维方式，建立新的思维方式的变革。这也可以从现代原子论建立的革命中看出来。当时，新建立的量子力学曾经指出，由于微观客体的间断与连续的统一，粒子性与波动性的统一，它们的结构是无法用经典的、习惯的机械模型直观地来表示的，而只有用数学模

---

① 参见中国科学院自然科学史研究所近现代史研究室，《二十世纪科学技术简史》，科学出版社，1985年；〔苏〕Б.М.凯德洛夫：“列宁对自然科学的最新革命的观点”，《自然科学哲学问题丛刊》1980年第4期；〔苏〕B.A.阿姆巴楚米扬、B.B.秋金斯基：“科学革命和宇宙研究的进展”，《自然科学哲学问题丛刊》1980年第1期。

型，通过抽象思维才能把握。因此，随着新的原子理论的建立，正如凯德洛夫所说，人们的思维方式，也是“从机械的直观性到数学的抽象性”① 的根本转变。

第三，新的科学研究方法的确立。例如，在推翻原子“不可分”的革命中，新的仪器设备和新的实验技术也起了重要作用。盖斯勒（H. Geissler，1814—1897）制成的真空管为X射线和电子的发现提供了必要条件，而云雾室的发明则对进一步研究各种辐射粒子轨迹起了很大作用，等等。由于新的仪器设备和新实验技术的出现，研究方法也发生了根本变化，化学实验手段从化学分析转到了仪器分析。

（2）化学革命的作用

化学革命将推动化学发展产生了质的飞跃，主要表现是：

化学研究对象的变化。例如，当现代原子论的建立，从而推翻了关于原子“不可分”的传统思想革命发生以后，化学的研究对象就有了很大发展和变化，即化学所研究的就不再仅仅是原子的化合和分子的分解的运动了，还要包括分子中或原子外层电子的运动状态；而从作为微观物质粒子的对象来说，化学就不仅要研究原子和分子，而且还要研究原子核和基本粒子等各层次物质的粒子及其运动规律，等等。

深入一步揭示化学运动的本质。由于现代原子论的革命揭示了原子核外电子运动规律和原子序数的实质，从而解决了门捷列夫元素周期律长期以来存在的种种矛盾，揭示出元素的性质随着原子量变化而呈现周期性变化的实质是在于元素的原子核外电子分布的周期性变化，使周期律有了更加坚实的理论基础。此外，在揭示原子核外电子运动规律的基础上，1927年海特勒和伦敦运用薛定谔方程研究氢分子，把量子力学概念引进化学，产生了量子化学，揭示了古典价键理论所不能阐明的化学键本质，开创了现代化学键理论的新阶段，等等，促使化学产生了巨大进展。

开辟化学发展的新时代。例如随着现代原子理论的建立，化学进入了现代发展时期。这场化学革命一方面使化学从研究原子延伸到电子，建立了量子化学；另一方面又从研究原子的电子壳层向原子核过渡，开辟了包括放射化学和辐射化学的核化学领域。此外，人们对原子和分子结构的认识也深入了一步，导致建立了价键理论和分子轨道理论，等等。此外，这次化学革命还为分析化学提供了许多可靠的、快速和精确的实验手段，使化学实验手段从传统的化学分析方法发展到了仪器分析方法，等等。这一切就使化学跨入了一个崭新的时代——现代化学发展的时代。

（3）化学革命发生的原因

化学革命的出现并不是偶然的，既有外部原因，又有内部因素。下面以氧化说推翻燃素说的革命为例做一说明。

第一，生产实践和化学实验为化学革命提供了基础。燃素说的一个致命弱点是不能解释金属煅烧后重量增加的事实。但燃素说却在一个时期统治了化学界，其中的一个重要原因就是当时的生产和实验水平不高，而把不是物理实体的燃素作为一种“元素”了。到十八世纪中叶，由于生产的发展而“把化学问题归束为一个中心问题”，即“燃烧的问题”②，而燃烧的问题又是伴随着“气体力学革命”③ 才解决的。蒸汽机的发明

① 〔苏〕Б.М.凯德洛夫：“列宁与科学革命”，《科学史译丛》1983年第1期，34页。
② 贝尔纳：《历史上的科学》，科学出版社，1983年，358页。
③ 同上，305页。

在社会生产中所产生的巨大作用，促使人们深入研究了气体的性质。比如冶金、炼焦和烧石灰等工业的发展，不仅迫切需要弄清燃烧的本质，而且也需要研究它所产生的气体的性质。又如在铅室法硫酸的生产中直接利用的就是生成的气体；在矿井中出现燃烧爆炸事故的也是可燃气体，等等。此外，对动物呼吸作用的研究，也加深了人们对空气的认识。显然，生产实践的发展就推动人们不得不付出巨大的精力去研究气体。在这种情况之下，1755年英国化学家布拉克第一个应用定量的方法研究了“固定空气”，发现石灰石煅烧放出气体后减少的重量，和用石灰水吸收这种气体生成的白色沉淀增加的重量相等。这就表明石灰石的煅烧同燃素存在与否并没有什么关系。实际上这就是对燃素说的一次有力批判。

第二，化学新发现的事实与燃素说的矛盾，从化学科学的内部推动了这次化学革命的产生。当时，由于人们对燃烧现象和呼吸作用进行了深入的研究，逐步认识了气体的多样性和空气的复杂性。一系列新气体的被发现及其性质的被认识，不断冲击着燃素说，特别是氧的发现，对彻底推翻燃素说起了决定性作用。“如果说足以推翻燃素说的种种证据构成一个链条，那么，这种新气体就是这一链条的最后一个环节。” 但是，氧的重大发现本身还不能引起化学革命。事实上，英国化学家普利斯特列和瑞典化学家舍勒首先发现了氧，但是由于他们受到旧的燃素说的束缚并没有认识到它的革命意义，因而并没有能在化学中引起任何变革。而法国化学家拉瓦锡由于能够以事实为根据，就勇敢地破除了燃素说的束缚，第一个对氧的意义作出了正确的解释，从而创立了氧化学说，推翻了燃素说。这次化学革命正是化学内部新事实与旧理论的矛盾运动的结果。

化 学 上 的 突 破

化学突破是指在化学发展中，化学知识积累到一定程度后所建立的新的基本概念、理论或理论体系，从而推动化学发展到一个新水平的过程。化学上的突破主要的表现形式是：（1）发现某一重要新现象，如发现氧和人工合成尿素等；（2）建立某一新理论，如原子学说、分子学说、有机结构理论、苯的环状结构学说和催化理论等；（3）发现某一重要新定律，如化学元素周期律、质量作用定律等；（4）采用某一重要的新仪器设备，如天平的使用等；（5）采用某一重要新方法，如定性分析法、定量分析法、仪器分析法和数学方法等；（6）提出某一重要新概念，如元素、原子、分子、大分子和化学键等；（7）开辟某一新领域，如电化学、核化学、高分子化学、结构化学和量子化学等。

应当看到，化学突破并不同于化学革命。后者既要破除化学中原有的基本概念和理论以及同它们相联系的思维方式，又要建立新的基本概念和理论及其思维方式。但是，化学突破并不打破旧的理论体系，只是对原有的理论体系进行局部的改造，或者甚至并未进行改造。它只是一种在以往化学成就基础上所建立起来的新的理论体系或新的实验方法，等等。比如道尔顿原子学说的建立，并没有对古代原子论和牛顿的微粒说进行根本的改造，而只是给予了科学的证实和说明，把各种化学现象和定律联系起来，进行了一次科学的综合，形成了一个统一的理论。但是，化学突破却也可以象化学革命一样，

---

① 〔美〕亨利·M·莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，151页。

推动化学发展产生质的飞跃，或开拓出新的领域，或跨人一个新时代。比如由于波义耳否定了“四元素说”和“三元素说”，建立了元素的新概念，就为化学确立了自己的研究对象，使化学从炼金术和医药化学的附属下独立出来，并使化学开始成为一门独立的科学。又如原子一分子学说的建立，使化学进行了一次大综合，标志着近代化学发展时期的开始。所以恩格斯说：“化学中的新时代是随着原子论开始的”[①]。而门捷列夫所取得的突破，则揭示了化学元素的原子量和性质之间的依赖关系，对化学进行了又一次辩证的综合，并为进一步揭示物质结构在原子层次上的普遍规律性提供了基础，从而把化学理论的发展提到了一个新高度，等等。化学突破和化学革命的作用虽然大体相同，但是在程度上又有区别。一般说来，化学突破的作用和影响并没有化学革命那样巨大和强烈。

化学的革命与突破的关系

由于化学中的革命和突破都是认识过程中的飞跃，因此有些文献把这种飞跃都叫做化学革命或不同类型的化学革命。有人不但把氧化学说推翻燃素说叫做化学革命，而且也把波义耳取得的成就也看作是“一场真正的化学革命”[②]。然而实际上两者矛盾的性质、质变的性质和飞跃的形式是不同的。

化学革命发端于新的实验事实同原有的理论之间的矛盾，这种矛盾是不可调和的，对抗性的，必然会引起化学的“危机”状态。要解决矛盾，克服“危机”，就必须打破旧的理论体系，建立新的理论体系，因此化学革命是解决化学中这种对抗性矛盾的一种最集中、最激烈、最彻底的斗争形式。化学突破也发端于新的实验事实同原有理论的矛盾，但这种矛盾是非对抗性的，解决这种矛盾不需要推翻旧理论，只要对旧理论进行局部改造，或者在旧理论基础上发展新理论就可以了。因此，化学突破是解决化学中这种非对抗性矛盾的一种比较缓和的斗争形式。

化学革命是在化学整体上发生的一次质的变化，而化学突破则是在化学的某一局部上发生的质的变化，即化学发展中的部分质变。例如，氧化学说推翻燃素说和现代原子论推翻原子绝对不可分的传统观点的革命，都是从基本概念、定律、理论和方法等整体上产生的根本变化。但是，波义耳取得的突破却主要只是在元素这一基本概念上产生的根本变化，是一种部分的质变。此外，有时也可以把突破看成是两次革命中间的两个不同的发展阶段。

质变是从一种质到另一种质的飞跃。由于化学革命和突破的矛盾性质不同，因此飞跃的形式也不同。化学革命是爆发式的飞跃，它是解决对抗性矛盾的质变形式，是质变过程中的对抗的斗争形式；化学突破是非爆发式的飞跃，它是解决非对抗性矛盾的变质形式，是质变过程中的非对抗的斗争形式。

在化学发展中，既有革命和突破，又有继承和积累。化学革命推翻了化学中占统治地位的旧理论体系和错误思想，建立了新的理论体系和正确的思想。但是，这种革命不管多么彻底，对传统理论中的合理因素都有所继承，因而在新的理论中，往往带着某些

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，269页。

② 〔美〕亨利·M·莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，128页。

旧的痕迹。所以，化学革命并不是否定化学中的一切，而是否定一切错误的东西，或改造部分错误的东西。原来体系中某些正确的东西仍以一定的形式存在于新的体系中。例如，氧化说否定了燃素说，以正确的燃烧理论代替了错误的燃烧理论。但是正如恩格斯所说："燃素说者的实验结果并不因此而完全被排除。相反地，这些实验结果仍然存在，只是它们的公式被倒过来了，从燃素说的语言翻译成了现今通用的化学的语言，因此它们还保持自己的有效性。"① 化学突破则需要在一定化学知识积累的基础上去建立新的理论体系，或在对原有理论体系进行局部改造的基础上去建立新的理论体系。所以，化学突破只有在化学知识的积累和继承的前提下才可能发生。例如，道尔顿原子学说是在继承了古代原子论和吸收了化学的基本定律成果的基础上才可能建立，没有这些继承就不会发展成为科学的原子学说。

边 克 忠

3. 化学理论发展的三个阶段

化学理论的发展，主要是以物质的化学组成、结构和反应等三大理论体系的产生、形成和发展为线索而展开的。大体上是经历了古代化学理论的萌芽、近代化学理论的形成和现代化学理论的发展等三个发展阶段。

古 代 化 学 理 论 的 萌 芽
（公元十六世纪以前）

在大约50万年或更早的时期以前，人类首先学会了利用天然火以获取化学能为生活和生产服务。其后，又掌握了摩擦生火等人工造火的化学技术，在火提供的高温条件下，则陆续形成了制陶（约公元前7000年）、冶铜（约公元前3500年）和炼铁（约公元前2000年）等古代高温化学工艺技术。实现了一系列物质的化学转化，为古代化学思想萌芽的产生，奠定了生产实践的基础。

（1）元素思想的萌芽。在公元前十一世纪或更早的时期，中国最早出现了"五行说"，认为万物是由金、木、水、火、土五种基本物质组成的。公元前五世纪，古希腊哲学家恩培多克勒（Empedocles，公元前490—前435）也提出了类似的由水、火、土、气组成万物的"四元素"说，等等，试图说明物质的组成和变化，这些学说都意识到了万物的统一性，具有了朴素唯物的元素思想，形成了早期的化学元素和物质组成思想的萌芽。

结构学说的雏形。公元前五世纪，古希腊哲学家留基伯（Leu Kippos，约公元前500—前440）和他的学生德谟克利特（Demokritos，约公元前460—前370）又进一步提出了原子论的思想，认为"四元素"以至万物都是以不可分割的原子微粒相结合的方式形成的。其后，中国思想家墨子（约公元前468—前376）也提出了相似于原子论的"端"说，认为万物都存在一种不可再分割的微粒"端"。以此解释物质的结构方式，这些思想已经直觉地猜测到了物质结构的不连续性，形成了原子学说的结构理论的雏

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，33页。

形。

（2）反应理论的胚胎。进入封建社会时期以后，社会的进步促进了古代化学工艺和古代化学思想的结合，推动化学逐步从生产实践中分化出来。并以炼金术的原始形态出现了。炼金术或炼丹术，是古人企图“点石成金”或炼制“长生不老”药物的方术。它在公元前二世纪或更早的时期首先出现在中国。其后，在公元一世纪也出现在埃及，到公元七世纪时，中国的炼金术又经阿拉伯传入欧洲并产生了巨大影响。炼金理论积极的主导思想是确信物质的可变性和相互转化性，认为物质间的化学转化以至元素的转化都是自然界的规律。著名的中国炼丹家魏伯阳（100—170）说，物质间的转化系“自然之所为”。葛洪（281—340）说，“变化者，乃天地之自然”，等等。这些思想具有着朴素辩证法的性质，蕴藏着化学反应理论的胚胎。它促进炼金家从事了大量化学实践活动，并从中认识了某些化学反应规律，发明了不少化学实验器具，以至最终演化为近代的化学科学。但是。炼金术所追求的目标是脱离现实和违背自然规律的。它的理论还掺杂有许多神秘主义的成分。它的发展是畸形的。因此，化学要走上健康发展的科学之路，还有待于从炼金术中解放出来。

近代化学理论的形成

（公元十七至十九世纪）

十六世纪以后，由于欧洲资本主义生产的发展，促使化学逐步摆脱了炼金术的束缚，并在十七世纪中叶跨入近代化学科学发展的新阶段。直到十九世纪末，经过前后200多年的演变，终于形成了近代化学科学的思想体系，主要表现是：

（1）元素理论的科学化和系统化。其标志是科学元素概念的建立和元素周期律的发现。在十六世纪初，瑞士医生帕拉塞尔士和德国医生阿格里柯拉分别创立和发展了医药化学和冶金化学，使原始形态的化学逐步面向生活和生产的实际，开始端正了研究方向，并积累了一些有关元素的实际知识。在此基础上，1661年，英国化学家波义耳在化学实验中深入认识到，元素是“用一般化学方法不能再分解成更简单的某些实物”，第一次提出了科学的元素概念，消除了炼金术神秘主义的元素思想，开始把化学确立为科学。这就为化学元素的相继发现、元素知识的系统化和物质组成理论的建立，开拓了发展道路。

到了1869年，人们已经发现了63种元素，积累的元素知识愈益庞杂，急需从中理出秩序，找到某种自然的规律性。虽然早在十九世纪初就已经开始了这一探索，但均未获得成功。直到1869年，俄罗斯化学家门捷列夫在前人工作的基础上，认识到了元素的质和原子的量之间的内在联系，终于发现了“元素性质随原子量的递增而发生周期性变化”的规律性，还依此修正了一些元素的原子量，预见了某些元素的存在及其性质，并惊人地得到了后来实践的证实。此外，在同一时期，德国化学家迈尔（Meyer，1830—1895）也独立地发现了元素周期律。这就把看来是杂乱无章的元素知识纳入到一个严整的自然体系之中，对于元素和物质组成的认识进行了一次系统的综合。同时，也进一步证明了辩证唯物主义的量质互变规律的普遍有效性，具有着重要的哲学意义。

（2）结构理论基础的形成。其标志是近代原子论、分子论和有机结构理论的建立。十八世纪的末叶，人们陆续发现了质量守恒定律（1789年）、当量定律（1791年）、

定比定律（1799年）和倍比定律（1803年）等化学基本定律，反映了化学反应中的一些重量关系，为近代原子论的形成或确立创造了条件，1803年，英国化学家道尔顿深人分析了基本定律所提供的经验事实，终于确证了原子的存在。从而把古代停留在臆测上的原子概念，赋与了可检验的具体物质内容，并进一步发展为科学的原子论。这样，人们就可以通过展示原子排列的图象来认识物质的内部结构，并开始建立了化学结构理论的基础。

1809年，法国化学家盖·吕萨克发现，同温同压条件下化学反应中的气体体积互成简单整数比的规律性。1811年，意大利化学家阿佛加德罗为了解释这一规律而提出了分子假说，认为由原子结合成的分子是保持物质化学性质的最小微粒，认识到了化学所研究的微观客体的特征，具有划时代的意义。但是，这一学说由于违背了当时居于统治地位的“电化二元学说”的观点，也由于还缺乏足够的实验根据而未获承认，被埋没达50年之久。1860年，意大利化学家康尼查罗进一步严密论证了分子假说，从而得到了最后确认，使人们认识到了原子和分子的差别和联系，结束了长期以来由于二者界限不清在化学上所造成的混乱，建立了全面的统一的物质结构理论——原子分子论，为进一步形成有机结构理论提供了基础。

早在1824年，德国化学家维勒首先在有机合成领域中取得了重大突破，用无机物氨水和氰酸首次合成了生物体内的有机物尿素，破除了神秘主义“生命力”论在有机化学中的统治，开辟了有机合成的新领域，并为有机结构理论的诞生创造了条件。1839年，法国化学家杜马基于有机物的取代作用，提出了具有初步结构观念的“类型论”，使人们逐渐注意于有机结构的研究。1852年，英国化学家弗兰克兰受到了“类型论”的启发，首次提出了原子价的思想，成为价键理论研究的开端。

1858年，德国化学家凯库勒进一步提出了碳的四价学说和碳链学说，开拓了有机结构理论研究的道路。1861年，在分子假说得到承认以后，俄国化学家布特列洛夫概括了当时的研究成果，认识到分子的性质取决于分子内部原子的种类、数目和结合顺序，强调提出了“化学结构”的概念，进而提出了有机结构理论，这一理论肯定了分子结构的可知性，明确了结构和性质的关系，解释了同分异构现象，并预言了某些尚未发现的化合物的存在，有力地指导了化学实践。此后，凯库勒又发现了苯环结构（1865年），荷兰化学家范霍夫和法国化学家勒贝尔分别提出了反映有机分子三维空间结构的立体结构学说（1874），瑞士化学家维尔纳（A. Werner，1866—1919）又引进了副价的概念，提出了说明络合物结构的配位理论（1893年），等等，至此，化学结构理论的基础已经形成。

（3）反应理论的革命和深化。其标志是氧化燃烧理论的建立和物理化学的诞生。十八世纪初，当时的化学仍是以火为中心而展开的，燃烧理论成了化学反应的主导理论，引起了广大化学家的注目。1703年，德国医生施塔尔（Stahl，1660—1734）基于对实验的观察提出了朴素的“燃素说”，认为可燃物都含有“燃素”，燃烧时燃素放出而剩下残渣，解释了当时大多数的化学反应，从而第一次对化学过程进行了统一说明，推动了化学的发展，并统治化学达百余年之久。但是，燃素是根本不存在的“元素”，因而燃素说也是错误的学说。当化学发展到较为精密的定量阶段时，就暴露出不可解脱的矛盾而成了进步的障碍、需要加以推翻了。1774年，英国化学家普利斯特利发现了本来

可以推翻燃素说的氧气，但是由于他笃信陈旧的理论，使他“当真理碰到鼻尖上的时候还是没有得到真理”。1777年，法国化学家拉瓦锡敏感地吸收了发现氧气的成果，并利用天平对燃烧过程进行了比较精密的研究，终于发现燃烧只是物质氧化的结果，而与燃素无关，燃素是虚有的，从而推翻了统治化学达百余年之久的燃素说，实现了化学上的一场深刻革命，引导化学持续地走上了健康发展的道路。

到了十九世纪中叶，化学开始注意于移植物理学的成果，以建立更为精密的定量的化学反应理论。1850年，法国化学家威廉米（Wilhelmy，1812—1864）首先研究了浓度对反应速度的影响，提出了化学反应的第一个数学表达式。1863年，挪威化学家古德贝格（Guldberg，1836—1902）等人进一步提出了质量作用定律，为化学动力学的发展奠定了基础。1869年，德国化学家霍斯特曼（Horstmann，1842—1929）运用熵的概念研究了化学物质的变化过程，开始将物理学中的热力学引进化学的研究领域。1875年，美国化学家吉布斯运用热力学理论进一步建立了“化学位”的概念，表达了化学体系的组分数量和内能变化的关系，以定量地判断化学反应中物质传递的方向。1876年，他依此又定量研究了非均匀体系的相平衡和化学平衡的条件，发现了著名的相律。1877年，荷兰化学家范霍夫第一次将“化学亲和力”区分为化学平衡和反应速度等两个方面，明确了二者的界限和联系，澄清了反应理论中的模糊认识。1882年，德国科学家赫尔姆霍茨又将化学体系的内能区分为束缚能和自由能两个部分，在常温常压下的自由能称为吉布斯自由能，可用以判断该条件下化学反应的方向和限度。至此，化学热力学的基础已经形成。与此同时，化学还移植了分子物理学、热学、电学和力学等物理学的理论，建立和发展了溶液理论、电离学说和电化学理论及化学动力学的基础。1887年，物理化学这一边缘学科的基本体系已初具规模，德国化学家奥斯特瓦尔德等人创办的《物理化学杂志》问世，标志着物理化学的诞生，并把化学科学的理论提到了前所未有的新高度。

现代化学理论的发展

（公元二十世纪以来）

二十世纪以来，化学思想有了重要的发展。进入二十世纪以后，化学理论借助于物理学而更加微观化、定量化和精密化了，逐步向理论科学的发展方向过渡。同时，还进一步探索了生命现象的本质，扩展了研究领域，并寻找着新的化学途径。主要表现是：

（1）元素思想发生了深刻变革。1896年，法国物理学家贝克勒尔发现了元素的放射性现象。1902年，英国物理学家卢瑟福等人进一步发现，放射性是由于元素的原子蜕变为另一种元素的原子而引起的，提出了元素蜕变的假说，打破了从波义耳以来的元素不变的传统观念，在元素思想上产生了一次变革。1910年，英国科学家索迪基于对大量实验事实的分析而认识到，一种元素会有两种或两种以上不同原子的元素变种存在，提出了同位素的假说，并在不久之后得到了证实，这就打破了从道尔顿以来的关于一种元素一种原子的传统观念，在元素思想上出现了又一次变革。1913年，英国科学家莫斯莱在X射线的研究中发现，元素的原子序数，实质是原子的核电荷数，解决了长期以来门捷列夫的化学元素周期律中存在的诸如碲和碘的原子量顺序颠倒等疑难问题，并将周期律提到了一个新的理论高度，在元素思想上引起了再一次变革，1919年，卢瑟福用α粒子轰击氮时使氮变成了氧，第一次实现了人工核反应，使一种元素变成了另一种元素，开创了

现代“炼金术”的新纪元，从而导致了元素思想的第四次变革。1939年，德国科学家哈恩（Hahn，1879—1968）等人在用中子轰击重元素铀原子核的实验中，发现了具有划时代意义的核裂变反应，开辟了原子能的新时代，产生了元素思想上的第五次变革。在四十年代以后，人们又陆续制成了第93号至第107号以及第109号等超铀元素或称为人造核素，并提出了超重元素的“稳定岛”的假说，探索着元素周期表的边界界限，在元素思想上酝酿着更大的突破，使化学元素的理论和人们对于物质化学组成的认识更加精细化和深刻化。

（2）结构理论深入到电子水平。自1897年英国物理学家汤姆生证实电子存在后，人们就开始了对于原子结构的探索，相继提出了“西瓜”式（1904）、“有核”式（1911年）和“壳层”式（1913年）等原子结构模型，并导致建立了电价理论（1916年）和共价理论（1916年）等两大经典的化学键理论，开始从电子的角度对分子的结构进行了较深入的研究，使人们的认识达到了一个新的阶段。但是，这些理论还只是停留在定性的描述上，还没有突破宏观牛顿力学的框架。1926年，奥地利物理学家薛定谔以波粒二象性的观点，建立了反映微观粒子运动规律的量子力学。据此人们提出了“电子云”式的原子结构模型，较好地描述了原子内部的状况，进而揭示出元素周期律的本质，并为现代分子结构理论的建立奠定了理论基础。1927年，英国化学家海特勒和伦敦开始运用量子力学处理氢分子的结构，用近似的方法计算体系的波函数和能量，以电子云的观点揭示了分子内化学键的本质，建立了量子化学，成为现代化学键理论研究的开端。

1931年，美国化学家鲍林等人又进一步对多原子分子的共价键进行研究，建立了现代化学键的价键理论。1932年，他又提出“共振论”进行了补充。同年，美国化学家密里肯（Mulliken，1896—）等人从分子的整体出发来说明化学键的形成，比价键理论解释了更多的事实，建立了现代化学键的分子轨道理论。1952年，英国化学家欧格耳（Orgell，1927—）为了解释“夹心型”化合物的结构，把分子轨道理论和晶体场理论结合起来，提出了配位场理论。至此，现代化学键理论已经具有了价键理论、分子轨道理论和配位场理论等三大理论基础，反映了人们对于分子结构的认识已经深入到电子水平，并为建立微观的化学反应理论创造了条件。

（3）反应理论进入微观发展阶段。二十世纪以来，化学在进一步发展经典的宏观反应理论的同时，还逐步建立了微观的反应理论。1952年，日本的量子化学家福井谦～（1918—）首先将分子轨道理论用于考察微观的化学反应机理，在《芳香烃反应的分子轨道论》的论文中，提出了“前线轨道”的概念，认为分子轨道中能量最高的填有电子的轨道和能量最低的空轨道，是化学反应中最关重要的轨道。1965年，美国化学家伍德沃德和霍夫曼（Hoffmann，1937—）进一步研究了反应的结构，在分析大量实验结果的基础上发现，化学反应中的分子的变化总是倾向于保持其轨道对称性不变的方式发生，并得到对称性不变的产物，从而建立了分子轨道对称性守恒原理。这一原理在解释和预示一系列化学反应进行的难易程度和产物的立体构型等方面具有重要指导作用。它的诞生，是结构理论从研究静态结构到动态结构，反应理论从宏观到微观发展的重要里程碑。在六十年代以后，由于激光和分子束技术的发展，微观反应动力学的研究已经深入到动态反应的层次，即可用选定量子态的反应物，来研究不同量子态的反应物转化到不同量子态产物的速率及其过程的微观细节。在时间尺度上的分辨能力可以达到10^{-12}秒，

在空间尺度进行"微区分析"可以达到分子量级（10^{-8}—10^{-6}厘米），并可以展示出某些分子的空间取向、电荷转移、能量传递和键的破立等过程细节，以逐步认识和控制化学反应机理的各个步骤，更好地掌握和运用化学运动规律。

（4）生命研究取得了重大突破。二十世纪以来，化学研究已经从无机和有机的领域，扩展到生命研究的领域，并在对蛋白质和核酸的两大类生命基础物质的研究中取得了重大突破。1902年，德国化学家费舍尔（Fischer，1852—1919）基于氨基酸缩合的实验结果，提出了蛋白质的多肽结构学说，否定了当时流行的蛋白质无规则结构的观点，引起了许多化学家对蛋白质结构的进一步探索。1930年前后，英国科学家贝尔纳（Bernal，1901—1971）利用X射线衍射法发现了蛋白质的折叠卷曲状结构。1936年，美国化学家鲍林发现了蛋白质分子中氢键支持缠绕结构的作用。1951年，他又发现了蛋白质的α螺旋结构。这两项成就奠定了研究生物大分子结构的基础。1956年，英国化学家桑格在对牛胰岛素这种最简单蛋白质的结构进行了十年不懈的研究之后，终于揭示了它的全部51个氨基酸的排列顺序和两个肽链间的硫硫键，为人工合成胰岛素提供了"设计蓝图"。1965年，我国化学家经过7年的集体研究后，第一次实现了人工合成胰岛素，开创了人工合成蛋白质的新阶段。这是有机化学领域继十九世纪人工合成尿素之后取得的又一重大突破，也表明了无机界、有机界和生命界的高度统一性。

在核酸的研究方面，1929年，美国科学家列文（Levene，1869—1940）等人对核酸的结构进行了初步研究，并区分为核糖核酸（RNA）和脱氧核糖核酸（DNA）等两种类型。1944年，法国细菌学家艾弗里（Avery，1877—1955）通过实验第一次证明了DNA是生物遗传信息的载体，唤起了人们对于核酸研究的重视。1952年，美国生物化学家查哥夫（Chargaff，1905—）精确测定了核酸中四种碱基的含量，发现它们并不是等量的，而只是嘌呤和嘧啶的当量相等，澄清了长期存在的错误认识，为核酸结构的发现创造了条件。1953年，美国生物学家沃森（Watson，1928—）和英国物理学家克里克（Criok，1916—）综合了当时学术界的研究成果，并经过创造性的深入研究，终于发现了DNA分子的双螺旋结构，从而在分子水平上合理地解释了生物遗传的机制，开辟了分子生物学的新纪元，在揭示生命奥秘的科学征途中迈出了重要一步。1961年，美国生物化学家尼伦贝格（Nirenberg，1927—）经过反复的实验研究，令人震惊地破译出生物遗传的第一个密码，发现了核酸中的碱基和蛋白质中氨基酸之间的本质联系，为进一步揭示生物遗传的奥秘开拓了道路。1969年，经过科学家的继续努力，最终全部破译出生物界的64个遗传密码，发现了DNA分子控制蛋白质合成的生物机制，从而使自孟德尔以来的一百多年中科学家为之奋斗终生的生物遗传规律，终于以生物大分子间信息的传递和分子变化的方式简明地表达出来。而且，由于从微生物到人类的全部生物界都共用这同一套遗传密码，再一次以惊人的方式表明了物质世界的辩证统一性。此后，许多种可溶性核糖核酸的一级结构被相继确定，人们开始了人工合成核酸的尝试。1972年，美国化学家考那拉（Khorana，1922—）等人使用模板技术合成了具有77个核苷酸片断的DNA，其后又合成出具有207个碱基对的具有生物活性的大肠杆菌DNA。1981年，我国科学家实现了世界上第一个具有完整生物活性的核糖核酸——酵母丙氨酸转移核糖核酸（由76个核苷酸组成）的人工合成，为进一步研究核酸的结构与功能的关系，揭开生命之谜，以及开展核酸类试剂和药物等应用研究，开辟了广阔的前景。

（5）现代化学向新的理论高度迈进。当前，化学中所积累起来的大量经验事实只是部分地找到了理论解释，所建立起来的理论不少还只是半经验和半定量的，对化学实践的指导还不够有力。因此，化学的发展趋势将是进一步提高理论水平，使化学日趋定量化、精细化和理论化，向新的理论高度迈进。今后需要加强研究的具体方面主要是：

重视基础理论研究，使化学在定性的基础上进一步定量化，并在发展宏观理论的同时进一步发展微观理论，以深入揭示物质的静态结构与化学性质。动态结构与化学反应之间的本质联系，全面掌握分子的组成——结构——性质——反应间相互作用的规律，精确考察分子的微观转化机理，判断化学反应的“允许”或“禁阻”，预示产物的构型和性能及建立分子设计的理论等等，以提高化学理论指导实践的能力，向化学的“自由王国”不断逼近。

加强应用化学的研究。使化学理论的发展具有雄厚的基础，特别是促进化学理论向化学实践的转化，更有效地为国民经济事业服务。根据美国《化学文摘》（CA）对化学文献数量增长率所作的统计，在1976—1980年期间化学中发展最为迅速的是应用化学和化学工程学的部分，其中尤以电化学、辐射化学、热能技术、水化学、核技术化学、空气污染和工业卫生等应用方面更为突出，这也反映了今后一段时间化学发展的一种趋向。

密切学科之间的联系。化学在进一步微观化、定量化和理论化的进程中，需要更加密切地联系数学，运用微分方程、线性代数、群论、矢量分析、不可约张量法和拓扑学等数学工具，对物质结构的信息和性能的物理量进行处理，或根据已有的经验规律抽象出数学模型，等等。同时，还需要密切联系物理学，以观察瞬间的化学反应过程，追踪个别粒子的动向和控制特定化学键的变化方向，等等。此外，加强化学同生物学的联系，不仅可以扩展研究领域，同生物学一起共同揭示生命的奥秘，而且还可以通过化学仿生来模拟生物高级活动的机制。改造旧的化学和化工过程，开辟新的反应路线，丰富和发展化学思想，等等。

注意化学总体的研究。随着化学研究领域的不断扩展，就使化学同其它学科之间具有更加密切的联系，形成的化学分支也越来越多，化学同各方面的关系则将越来越复杂。因此，这就特别需要注意对化学总体的研究，以深入认识化学理论和化学实践、化学理论和化学理论、化学科学和其它科学、化学家和化学家以及化学和生产、化学和哲学、化学和教育、化学和社会等相互之间的关系；深入探讨化学研究的对象、特点、意义、体系、结构和动力等具有普遍意义的课题，并从发展的角度研究化学概念和理论等化学思想的演化规律，吸取经验、教训、启示、借鉴，预见未来化学发展的趋势，等等，从整体上、战略上掌握和运用化学发展的规律，以自觉地促进化学和化学思想的发展。

化学的理论和概念，做为一种知识形态的生产力，将会向新社会永恒地无偿地馈赠自然的礼物，将为人类提供出无限宝贵的物质财富。人们认识和掌握了化学思想发展的规律性，就可以不断促进化学科学的发展，为人类做出更大贡献。

廖 正 衡

*本文写作中主要参考了下列文献：

〔1〕《化学发展简史》，科学出版社，1980年。
〔2〕〔英〕J.R.柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1976年。

〔3〕〔日〕山冈望：《化学史传》，日本东京内田老鹤圃新社，1976年。
〔4〕C.Singer, *A short history of scientific ideas to* 1900, London, 1959.
〔5〕M.Leicester, *The historical background chemistry*, New York, 1956.
〔6〕Б.М.Кедров, Энгльс о развитии химии наука, М, 1979.

4. 物质结构理论在十九世纪的进展

在人类文化史上，十九世纪被称为"科学世纪"，用马克思的话说，就是给予全人类以文明和文化的世纪。在"科学世纪"里，各门科学都有了长足的进步。而化学在探索物质结构的奥秘方面，同其它学科相比做出了尤为突出的贡献，成为近代科学中一个突飞猛进的学科。

物质结构认识上的成就

十九世纪的化学研究，总的来说是围绕着物质组成、结构及其变化规律这一主线进行的。使化学在宏观水平上对物质的微观性质具有比较深刻的认识，相继出现了一系列新的科学理论。

在物质结构认识上，首先建立的新理论是英国化学家道尔顿的原子学说。它对原子的描述不再是含糊不清的观念，而是赋予了具体内容，是一种从微观物质角度去揭示宏观化学现象本质的科学理论。其依据是：第一，道尔顿明确地提出了以原子量为基本特征的原子"形象"，把原子区分为不同的类型；第二，指出不同类型的原子又能相互化合，生成两种或两种以上更复杂的化合物，这就表明了不同物质的化学成分的差异；第三，明确了物质结构及其性质变化之间存在着内在的联系，又从化学性质上了解了元素和化合物的差异；第四，道尔顿原子论建立在化学实验基础之上，具有充分的科学根据。因此，原子理论能说明化学现象和化学定律间的内在联系，又能把人类对物质结构的认识提到一个新高度，并为继续探索明确了方向。新原子论的问世引起了化学界的普遍关注，也引起了哲学界的重视。对此恩格斯有过很高地评价。他说，道尔顿的原子论是"给整个科学创造一个中心并给研究工作打下巩固基础的发现。"①

在此基础上，1811年意大利物理学家阿佛加德罗进一步提出了分子假说，并在大约50年以后经意大利化学家康尼查罗的强调而得到了化学界的承认。这样就使原子论和分子论终于结合成一体，形成了近代科学的原子分子论。它不仅明确了原子和分子间的联系和差别；而且也进一步认识了原子和分子在化学反应中的特性，即原子基本保持不变，分子则要拆开发生质的变化。原子分子论使人们在物质结构认识的深度上，又产生了新的飞跃。

随后，不论在研究元素之间的内在联系和发现元素的变化规律上，还是在有机物结构和性质关系的研究上都有了飞速地进展。在这方面有较突出贡献的是俄国化学家门捷列夫，以及德国化学家迈耶尔，他们发现了"元素（以及由元素所形成的单质或化合物）

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，96页。

的性质周期性地随着它们的原子量而改变”[①]的规律。

门捷列夫元素周期律是在原子分子论思想的指导下发现的，但是它又为人们进一步深入认识物质结构提供了基础。因为，这一规律的发现，不仅把杂乱的元素用一条完整的自然序列统一起来，呈现出具有规律性变化的元素体系，而且也还预示着原子内部所具有的复杂结构的性质，从而开拓了深入认识物质结构的道路。元素周期律的发现，是人们从宏观元素的量透视到微观原子结构的质的一个过渡。它既为人们探索新元素提供了一条可遵循的规律；也为进一步了解元素周期律的本质打下了良好的理论基础 。

在这个时期，有机结构理论研究也加快了步伐，先后提出不少新学说或新理论。特别是十九世纪六十年代，俄国有机化学家布特列洛夫对有机化合物的化学性质与结构之间存在着依赖关系进行了理论的概括：即认识到分子的结构就可以推出它的化学性质；反之，知道化学性质也可以推出它的分子结构。这个概括，标志有机结构理论的诞生，并为人们用化学方法认识和确定有机化合物的结构提供了理论基础，也为人们对于分子结构的继续探索开拓了广阔的道路。从此以后，有机化合物结构的研究不仅仅局限在平面结构，而是深入探讨空间结构的排列规律。从而创立了有机立体结构理论。这又把人类对物质结构的认识推进一步。

十九世纪，物质结构认识上的一个又一个理论成就表明，化学在确证原子存在方面做了大量的工作。虽然这些工作仍是对原子的外部表现规律的概括，但是，它把人类对物质结构的认识变成科学，也为进一步揭开原子内部的奥秘开辟了新的途径。

物质结构理论是前人认识的继续

十九世纪的化学，在物质结构理论上的建树，是他们在吸取了前人认识成果的基础上创新和发展起来的。

道尔顿原子论建立以前，人类对物质结构的认识已有其历史。化学作为研究物质性质及其变化规律的科学渊源于古代。从人类对火的认识到冶炼金属、烧制陶瓷和玻璃等等，就开始对自然界的物质结构作出了一些有意义的猜测，提出了古代原子论。但是，这种就自然界本身来说明自然界的原始学说，缺乏实验事实做为根据，还只是一种哲学臆测。这种哲学臆测曾遭受到中世纪经院哲学的禁锢，致使对物质结构的研究停滞不前。到十七、十八世纪，由于实验科学的兴起，人们开始注目于物质结构的研究，在接触物质的机械运动过程中，逐步加深了对物质的机械性能和结构的认识。伽桑狄、波义耳、牛顿等人相继提出了物质“是某种最小微粒构成”的思想。十八世纪末，法国化学家拉瓦锡和德国化学家里希特（Jeremias Banjamia Richter，1762—1807）等相继发现了一系列带有经验性的化学基本定律，揭示了化学反应中，反应物和生成物间存在一定的数量关系，为道尔顿原子论的诞生提供了经验基础。道尔顿正是批判地继承和吸取了前人的科学思想，带着先辈尚未完成的课题，踏着前人的足迹，在进行大气成分的实验研究中，才创立了新原子论的。原子论虽然还保持“原子是绝对不可分割”的旧思想，但是它毕竟回答了前人不曾回答的问题。不仅能够说明各种化学定律间的内在联系，而且也揭示出物质在化学变化中所具有一定数量关系的实质。道尔顿原子论既是前人思想

① 《化学发展简史》编写组：《化学发展简史》，科学出版社，1980年，128页。

的继承，又是前人思想的创新和发展。

元素周期律、有机结构理论是继原子论之后对物质结构认识的理论成果。当然，这些理论也都是在前人略具“雏形”的“三元素组”、“螺旋图”、“八音律”等元素的分类工作的基础上完成的创造性工作，否则也就不会有门捷列夫的元素周期律。同样，如果没有“基团论”、“取代说”、“类型论”等尝试性的学说，也就不会有有机结构理论。

物质结构理论和其它自然科学理论一样，都是植根于继承，成长于创新。在继承基础上的不断创新是科学发展的客观规律，也是化学发展的客观规律。因此，只有切实地认识和掌握这条规律，才能推动化学和整个自然科学不断前进。

物质结构理论的实践意义

科学理论是关于自然现象和规律的概括。化学科学理论也是如此。它是对化学运动规律的概括。而理论一旦形成又会对生产和科学实验起作用，起到指导生产、指导科学实验和制造新产品的作用。当人们搞清楚有机物分子结构和性质的关系，产生了新理论以后，就在有机结构理论的指导下，沿着“先测定分子结构，再用人工方法去制造”的途径，实现了多种有机物的合成，茜素染料的合成就是一个典型事例。

纺织品染色原来使用的是天然茜草染料。由于纺织生产的发展，天然茜草染料供不应求，急待用人工去合成。德国青年化学家格雷贝和里伯曼开始合作研究茜素的分子结构。1869年他们终于认识了茜素结构，并在实验室中以煤焦油中提出的蒽为原料，实现了人工合成。当把这一实验结果运用到工业生产上时，就实现了茜素的大批量生产。这一惊人的创举曾经得到了恩格斯的赞扬。他说：“……茜素，我们已经不再从田地里的茜草根中取得，而且是用便宜得多、简单得多的方法从煤焦油里提炼出来了。”[①]合成染料成功以后，又合成了许多有机新产品，致使形成了以煤焦油为原料的有机合成工业。随着有机物质原料来源的扩大，有机合成工业也得到了进一步发展。在现代，不仅人工能够合成橡胶、染料、维生素、油脂、纤维、药剂等许多制品，而且还合成出了自然界所从来没有过的新产品。有机结构理论在有机合成的过程中，将会发挥它更大的作用。

此外，人们对于物质结构认识的不断深入，也加强了化学与物理学的关系。

十九世纪的化学，虽然在确证原子的存在方面做了大量的工作，但人们对于原子的认识还只是局限于外部，尚未触及到原子的内部结构，因此还不能算是真正认识了原子，比如，原子有没有结构，有什么样的结构等问题都还是“不解之谜”。这些问题从化学研究中提出来，却引起了物理学家的极大的关心和兴趣。因此，从十九世纪末开始，对于物质结构的研究，就已经不单单是化学家们的研究课题，也成了物理学家研究的重要内容了。这样就使人们对物质结构的研究进入到一个新的历史时期，十九世纪末物理学的成果，打开了原子的大门，使人们认识到原子是由原子核和电子所组成。经过卢瑟福、玻尔、薛定谔等物理学家的努力，终于逐步比较正确地认识了原子的结构。这样就使化学和物理学一起，在原子核外的结构层次上进行了卓有成效的合作与探索。

---

① 《马克思恩格斯选集》第4卷，人民出版社，1972年，222页。

这种探索不仅揭示了元素周期律的本质，而且还对化学键的实质有了比较清楚的认识，从而推动化学进入了现代时期。

通过对物质结构的研究，使化学和物理学的关系更加密切了。随着自然科学的飞速发展人们对物质结构的认识必将会取得更加惊人的成就。

纪 素 珍

5.电离学说的确立及其借鉴

1884年瑞典化学家阿累尼乌斯提出的电离学说，是化学发展中的一次带有革命性的重要发现。它同原子论、分子论和元素周期律等学说一起，共同奠定了现代化学的理论基础。阿累尼乌斯由此荣获了1903年的诺贝尔化学奖金。但是，电离学说从刚刚诞生起就遭到了许多责难，以致不得不在经历了一场艰苦和激烈的斗争以后才得以确立。1984年，恰恰是电离学说发表的一百周年，人们回顾一下这一斗争的过程，将会是不无教益的。

一个创新学说的提出

1799年，物理学家伏特（Volta，1745—1827）发明了电池以后，化学家戴维、法拉第、格罗特斯（Grotthuss，1785—1822）、希托夫（Hittorf，德，1824—1914）、拉乌尔（Raoult，法，1830—1901）和克劳胥斯（Clausius，德，1822—1888）等人就陆续开展了电化学和溶液理论的研究，并取得了不少重要成果。但是，对于溶液中电解质性质的认识，主导的看法却仍然是认为只有在外界电流的作用下电解质才可能离解为带电的离子。这样就还未能揭示出电解质溶液的本质，阻碍着化学的发展。

1882年，年仅23岁的青年学者阿累尼乌斯，在前人成果的基础上进行了溶液导电性的研究。他在实验中发现，氨气本身虽然并不导电，然而其水溶液却可导电，而且溶液越稀，导电性越强。1883年，他对这一现象进行了深入的理论分析。他认识到，要想得到解释，就必须打破流行的传统观念，假定溶液中的电解质在无外界电流的作用下就可以存在两种形态，即非活性（分子）态和活性（离子）态①。当溶液稀释时就可以使前者更多地转化为后者，从而使导电度增强。他并依此撰写出科学论文，准备进行博士学位的答辩。1884年，他在此基础上发表了题为《电解质的导电性研究》②的论文，公开提出了电离学说。

不久，新学说就进一步得到了许多科学实验的证实。1886年，著名德国化学家奥斯特瓦尔德在研究酸的催化作用中发现，酯的水解速度和蔗糖的转化速度，都取决于酸解离后生成的氢离子的浓度，证实了酸是发生了电离。同年，著名荷兰化学家范霍夫在研究电解质溶液的渗透压（P）时发现，实际测定出的P值总要比理论（依公式PV＝RT）计算出的P值高很多，需要附加上一个系数(i)进行校正（使公式成为PV＝iRT）③。由

---

①〔日〕安田德太郎译《タンネマン大自然科学史》，第11卷，日本三省堂，1983年，424页。

②Recherches sur la conductibilité galvanique des électrolytes，发表在Bihang till Kongliga SvenskaVetenskaps—Akademiens Handlingar，Stockholm，7，13，63（1884）。

③〔日〕安田德太郎译：《タンネマン大自然科学史》第11卷，日本三省堂，1983年，411页。

于P值的高低系取决于溶液中溶质的微粒数目的多少，因此，P值的增高就是微粒数目增多的表现，是电解质电离成更多离子的证明。此外，阿累尼乌斯又从溶液的导电率、渗透质和冰点降低等不同侧面对i值进行了精确测定，惊人地发现都是一致的。这说明此类不同侧面的现象原来都是同一的电离过程的种种表现。因此，i的存在正是对电离学说的一个定量的、更有力的证明。这样，电离学说就从一个科学假说提升为一个精密的定量的科学理论。对此，阿累尼乌斯在1887年又发表了题为《关于溶质在水中的离解》的论文①，其中引用了更为精确的实验结果，并以“电离”和“电离度”等明确的概念代替了“活化”和“活化系数”等不大明确的概念，对电离学说进行了比较全面、系统和深入的阐述和论证。至此，一个具有科学创见的新学说终于最后形成了。

同传统观念的矛盾

阿累尼乌斯学说用崭新的思想揭示了电解质溶液的本性，破除了当时流行的理论的束缚，这使它从一问世起就遭到了传统偏见势力的发难。

1883年，阿累尼乌斯把新学说的思想汇报给了母校乌普萨拉大学的克列维(Cleve，瑞典，1840—1905)教授。这位化学家曾因发现钬(Ho)等稀土元素而闻名于世，同时在地质学和植物学的研究上也有很高造诣。阿累尼乌斯热切期望能得到他的支持和帮助。然而没有想到他却毫不掩饰地嘲讽说，“纯粹是胡说八道”，是把“鼻子伸进不该去的地方”了。阿累尼乌斯后来回忆说，他是“让我明白，要他再细听这种滑稽可笑的议论，就要降低他的身价了”②。

1884年，阿累尼乌斯在乌普萨拉大学博士学位答辩会上宣读了论文后，不少人都觉得难以容忍这种“荒谬绝伦”的想法，认为“纯粹是空想”。克列维说，“我不能想像，比如，氯化钾怎么会在水中分解为离子。钾在溶液中能独立存在吗？任何一个小学生都知道，钾遇水就产生强烈反应，同时形成氢氧化钾和氢气；氯的水溶液是淡绿色的，又有剧毒。可是氯化钾的水溶液却是无色的，完全无毒。”③他们认为，这些事实似乎就充分“证明”电离学说是一种“无稽之谈”了。新学说在乌普萨拉大学遭到了几乎所有化学家和物理学家的冷遇。然而实际上正是这些专家们自己并未能分清原子和离子的本质区别而犯了错误。

对电离学说的责难并不止于此。当阿累尼乌斯的论文公开发表以后，就遭致了更大规模的攻击。英、德、法、俄等许多国家的化学家，其中包括一些在声望上远远超过克列维教授的著名化学家，都群起而攻之，形成了一条国际化学界的反对阵线。为首的就是大名鼎鼎的以发现元素周期律而享有极高盛誉的俄国化学家门捷列夫，此外，还有以研究溶液理论著称的英国化学家阿姆斯特朗(Armstrong，1848—1937)，以发明溶液渗透膜闻名的法国化学家特劳贝（Traube，1826—1894），以研究溶液电动现象著称的德国化学家魏德曼（Wiedemann），以建立“溶液蒸汽张力”定律知名的俄国化学家

---

① S.Arrhenius, *Über die Dissociation der in Wasser gelösten Stoff*, Z.Phys.Chem, II, 631—648 (1887).

② S.Arrhenius, *Aus meiner Jugendzeit*, Leipzig, 2—8 (1913).

③ 〔保〕卡·马诺洛夫：《名化学家小传》下册，科学普及出版社，1981年，263页。

柯诺瓦洛夫（Коновалов，1856—1929），以及化学家皮可林（Pikering）和别凯托夫（Бекетов）等等。他们认为，由于电离学说违背了戴维和法拉第所建立的经典的电化学理论，因而是"奇谈怪论"，"不值一提"①，迟早会被推翻。对此，门捷列夫曾预言说，"这个假说随着时间的转移将占有如燃素论所早已占有的那种地位"而必将失败。它像燃素学说一样，虽然也"曾有过不少热心的捍卫者"，然而却是在"捍卫一种不正确的假说"②。电离学说受到了传统偏见的暴风雨般的打击。

"离子主义者联盟"的胜利

年轻的阿累尼乌斯在旧观念者的攻击面前并没有表现怯懦、动摇和丧失信心。他坚信自己从科学实验中概括出来的科学学说是正确的，并决心为捍卫科学的真理而进行一场不屈的斗争。正如化学家帕尔美（Palmaer）评价他时所说，"他那真正瑞典人的性格——特别好斗，然而又温厚，并同那有声有色的幽默相结合，就使他能够在战斗时很好的认清事态"③。他勇敢地投入了斗争。

为了寻求知音者的支持，他在那次论文答辩后的第二天，就把论文分别寄给了另外几位著名的化学家奥斯特瓦尔德、范霍夫、克劳胥斯和迈尔（Meyer）等人，征求他们的意见。这些化学家同门捷列夫等人的保守态度相反，都给予了积极肯定。特别是奥斯特瓦尔德很感兴趣，还不远千里亲自到乌普萨拉来同他一起讨论。范霍夫也很重视新学说，称赞它是"物理化学史上的一次革命"。这样，阿累尼乌斯、奥斯特瓦尔德和范霍夫等三人就组成了一个巩固的"离子主义者联盟"，团结一致，共同向保守势力展开了斗争。他们的人数虽然不多，然而却掌握着可靠的事实，被誉为是一支"能征善战"和不断取得胜利的"离子学家的奇军"。斗争的不断胜利，使阿累尼乌斯深受鼓舞。他说，自己能够"经历并直接参加如此蓬勃的科学发展，乃是一种唯有幻想才能及的最大幸福"④。

但是，旧思想在一些化学家的头脑中还是根深蒂固的。许多化学家仍然在报刊和杂志及学术会议上不断攻击电离学说，"告诫"青年千万不要醉心于那种狂妄的荒谬的新学说。阿累尼乌斯不得不写出一篇篇文章进行批驳。他同奥斯特瓦尔德和范霍夫等人一起回答了诸如电解质电离的能量来源，电荷相反的离子未能成对结合的原因，亲和力强的电解质反而易电离的道理等一系列具体问题，进一步提高了电离学说的说服力。1889年门捷列夫又发表了《溶质离解简论》⑤，对电离理论进行了再次抨击。阿累尼乌斯则当即予以批驳，强调指出，虽然门捷列夫的观点得到了许多著名化学家的支持，但是也"不能同意这位伟大的俄国化学家的见解"，因为他"忽视了构成离解理论的那种东西的主要部分"，没有看到"大量的物理化学问题都是靠了渗透质和电离理论才得到解决的"⑥。

---

① 《诺贝尔奖金获得者传》第Ⅰ卷，湖南科学技术出版社，1981年，136页。
② Ю.И.索洛维耶夫等：《阿累尼乌斯传》，商务印书馆，1965年，71页。
③ W.Palmaer, *Das Buch der Grossen Chemiker*, Leipzig, Ⅰ, 548 (1930)。
④ 同②，63页。
⑤ 门捷列夫："溶质离解简论"，《俄国物理化学协会学报》，1889年第21卷4期，199页。
⑥ 同②，69页。

经过了反复和艰苦的斗争以后，电离学说逐渐赢得了越来越多科学家的承认。著名德国物理学家普朗克以他严整的热力学观点给予了有力支持。著名奥地利物理学家玻尔兹曼（Boltzmann，1844—1906）和著名荷兰物理学家范德华（Van Der Waals，1837—1923）等人也都积极肯定。电离学说提供的大量科学事实已经是无可非议和无可辩驳的了。这样，电离学说终于征服了一个个艰难险阻，取得了最后胜利，促进了化学发展。

电离学说的确立，消除了电解质溶液渗透压反常的矛盾，解释了酸的催化作用机理，揭示了酸的氢离子的共同本质，建立了原子和电子的联系，并为价电子理论的形成提供了前提。它阐明了溶液电导和冰点降低等一系列物理化学现象的实质，并奠定了作为"离子科学部门"的分析化学的理论基础，使其从一种操作技艺提升为一门科学。此外，它还指导了所有溶液化学反应（也是大多数化学反应）的研究。它的确立，无愧是继原子论、分子论和元素周期律之后在化学发展中取得的又一重大理论成果。

电离学说的作用还远远超过了化学学科本身的界限。它进一步沟通了化学和物理学的联系，促进了物理学的发展。它还有力地指导了制碱制氯、熔盐电解和有色冶金等生产实践，使化学工业和冶金工业取得了重大进展。它"被证明在现代科学一切部门中都是适用而有益的"。因此，有的科学史家把电离学说视为十九世纪科学发展中的"最大总结之一"①是并不过分的。

阿累尼乌斯做为电离学说的创建者获得了一系列崇高的荣誉。1901年当选为瑞典皇家科学院院士。1903年荣获英国皇家学会的戴维勋章。同年，又荣获诺贝尔化学奖金，成为瑞典的第一个和世界上第三个诺贝尔化学奖的获得者。1905年至1927年间荣任诺贝尔物理学和化学研究所的理事长②，直到逝世。这些荣誉，正是他和他的"离子主义者联盟"在捍卫科学真理的斗争中所取得的最后胜利的标志。

值 得 汲 取 的 借 鉴

人们从围绕电离学说的这场论争中可以汲取到一些有益的历史借鉴。

（1）先驱者应当准备去克服重重精神障碍。这场论争表明，一个破除了传统观念的新学说，往往都不会立即为人们所接受，相反，却会遭到轻视以至打击，碰到重重精神障碍。其主要原因是，首先，许多未能自觉地以实践做为真理标准的科学家，往往习惯于依照旧理论的框架去判断新学说的是非正误。例如克列维教授等人就是根据"无外界电流的作用就不能电离"的旧理论来讥讽电离学说是"无稽之谈"的。这样，正像科学史家贝弗里奇（Beveridge）所说，就会产生一种"对新设想的抗拒心理"③；其次，人们在接受新思想时还需要有一个过程。新学说离旧的主宰理论相距较远，甚至是背道而驰，难于为人们所立即理解。比如电离学说提出的分子中的"原子会自动转变为带电的离子"的观点，对于当时还认为"原子不可分"和对原子结构全然无所了解的人来说，显然是难以接受，甚至还会认为是一种"胡说八道"；第三，新学说总不会是完美无缺的。比如电离学说就存在着在浓溶液中的偏差和忽视了溶剂作用等缺陷，从而就

---

① Ю.И.索洛维耶夫等，《阿累尼乌斯传》，商务印书馆，1965年，8页。

② 〔日〕山冈望：《化学史尘》，东京内田老鹤圃新社，1978年，46页。

③ 贝弗里奇，《科学研究的艺术》，科学出版社，1979年，110页。

容易为那些求全责备的反对者片面夸大，进行攻击。因此，先驱者对其所提出的新学说就不能期望立即得到承认，一帆风顺地取得成功。相反，却应做好充分准备去克服前进道路上的重重精神障碍，象阿累尼乌斯那样去进行一场曲折和艰苦的斗争，去争取胜利。

同时，也应当看到，精神障碍对于科学发展来说，一方面固然是有害的，然而另一方面也并不无好处。因为它可以使新学说接受正反两个方面的严峻考验，促使先驱者必须依靠更全面、更深入的科学实践来证明新学说的真理性，从而能够使科学扎实地发展。此外，它还可以防止那些佐证不足或粗制滥造的假说的猖獗泛滥，以尽早加以淘汰。因此，无论从积极或消极方面来看，先驱者都应当做好克服精神障碍的准备。

（2）成功者需要具有视真理高于一切的勇气。阿累尼乌斯的斗争实践表明，成功者面对传统偏见的挑战，应当具有为坚持真理而斗争的无畏勇气，正如马克思所说，在科学的入口处，一切疑惧都须抛弃，一切怯懦都须化除[①]。否则就会半途而废，不能成功。例如，化学家希托夫早在1858年就具有过接近于电离学说的思想，认为“离子的产生不一定是电流作用的结果”[②]，然而由于立即招致了强烈的反对而使他失去了坚持真理的勇气，以至功亏一篑，相反，敢于进行斗争的阿累尼乌斯则取得了成功。可见，“发现者，尤其是一个初出茅庐的发现者，需要勇气才能无视他人的冷漠和怀疑，才能坚信自己发现的意义”，否则就会由于“缺乏必要的热情和勇气，放弃了有益的研究，而湮没于无闻！”[③]。

应当看到，勇气并不是凭空产生的，而是从科学实践中获取的品质。阿累尼乌斯之所以敢于同强大的传统偏见势力展开无畏的论战，就是由于他在有关导电度、渗透压和酸的催化等科学实践中找到了确凿无疑的根据，从而表现出勇敢坚定和不屈不挠。

（3）研究者应当发挥互助合作的威力。电离学说的确立表明，由奥斯特瓦尔德、范霍夫和阿累尼乌斯组成的“离子主义者联盟”的密切合作和相互支持，是夺取斗争胜利的一个重要因素。他们还合作创建了做为物理化学正式诞生标志的著名的《物理化学杂志》，一直出版至今，产生了深远的重要影响。他们三人的密切合作，被誉为是在演奏着美妙和谐的弦乐“三重奏”，成为化学史上相传的一段佳话。历史表明，研究者的密切合作是科学发展的一条重要途径。

应当怎样加强合作，从“离子主义者联盟”看来，第一，合作者需要有认真的严谨的态度，不要轻率否定他人的研究成果。例如，当奥斯特瓦尔德刚刚读到阿累尼乌斯的论文时，“倾向于整个地把它看成是无稽之谈”而要加以否定。但是，在他做了认真的仔细的阅读之后就发现其中的新观点是那么深刻，以至把他“打算花费整整一生的时间去研究的问题”，都“已经解决了”[④]，从而产生了同阿累尼乌斯进行合作的迫切愿望；第二，合作者应当建立平等和谐的关系。年轻的阿累尼乌斯在“离子主义者联盟”合作中的一个深切感受就是，当时已经享有盛名的年长的奥斯特瓦尔德和范霍夫等人都“并不把他看成是黄口孺子的小学生”，而“都拿他当自己的同事”[⑤]平等相待，和谐一

---

① 《马克思恩格斯选集》第2卷，人民出版社，65页。

② J.W.Hittorf, *Poggendorfs Ann.Physik*. 103, 53(1858)。

③ 贝弗里奇：《科学研究的艺术》，科学出版社，1979年，116页。

④ W.Ostwald, *Lebenslinien einer Selbstbiographie*, Berlin, I, 216(1926)。

⑤ Ю. И.索洛维耶夫等：《阿累尼乌斯传》，商书印书馆，1965年，13页。

致，使阿累尼乌斯能够在斗争中无拘束地冲锋陷阵，发挥年轻人的特有作用。第三，合作者应当各有所长以互得益彰。阿累尼乌斯对电离的研究解决了范霍夫渗透压研究中反常的矛盾，揭示了奥斯特瓦尔德在酸催化作用研究中的机理，为二人的研究提供了理论指导。反之，二人的研究又为电离学说提供了实验依据，等等，联系密切，互为补充，成了他们巩固合作的客观基础。

（4）应当避免经验主义史观的错误。门捷列夫等人在电离学说上的错误并非偶然，而是流行于十九世纪化学领域中的经验主义思潮的一种表现。当时，许多化学家都亲身经历过一些化学理论的兴衰曲折，诸如曾经做为化学核心理论的燃素学说，做为阐述物质结构的电化二元学说，有机化学中的生命力论，元素构成的普劳特假说等等，虽然都曾经被认为是科学真理而使人坚信不移和炫赫一时，然而曾几何时就又被新发现的科学事实所否定和淘汰。正像出现在在科学天际上的流星，明亮而又倏忽地陨灭了。这样就使一些化学家产生了一种错觉，以为"标新立异"的理论是靠不住的，而只有经验才可信赖。他们只满足于实验研究本身，或现成的传统的理论，感受不到发展新理论的迫切需要。相反，对于那些破除了传统观念的新学说的出现，总会自发地产生一种怀疑乃至抵制的态度，甚至还会像门捷列夫那样，依照经验主义史观的逻辑，断言新兴的电离学说也会像过去的燃素学说一样会被推翻，等等。这显然是有害的。人们应当以实践的标准来对新学说进行具体分析，而不能形而上学地汲取历史的"借鉴"，经验主义地反对新学说。人们既应尊重科学的过去历史，也应尊重现实和未来的科学发展，尊重新的科学实践。否则必将成为科学发展面前的一个保守者。应当引以为戒。

（5）应当对科学界的"权威"进行全面分析。从这场斗争中可以看出，一个科学界的"权威"并不会是完全正确或完全错误的。可能在这一领域或这个问题上是正确的，在那一领域或那个问题上又是错误的。或者相反。例如，门捷列夫在建立元素周期律的过程中，能够应用"黑格尔的量转化为质的规律"，从而"完成了科学上的一个勋业"①，为化学的发展树立了一个里程碑，不愧是一位伟大的杰出的化学家；但是在电离学说的问题上却又犯了错误，甚至还像今天的一些中学生一样，并没有搞清楚电能和电离，原子和离子的本质区别，又显得很渺小了。反之，像奥斯特瓦尔德，他在哲学上和科学上都犯了不少错误，曾经是唯心主义的"唯能论"的鼓吹者，把能量视为万物的本原，从而导致反对科学的原子论和分子论，因而受到过革命导师列宁和广大科学家的深刻批判；但是，在对待电离学说上他却不像门捷列夫等人那样墨守成规，而是给予热情扶持直到得以确立。他还发现和培养了年轻的阿累尼乌斯，不愧是一位可敬的"伯乐"。他在催化剂研究上的巨大贡献，还使他成了诺贝尔化学奖的获得者，等等。所以，对于科学界的"权威"，既不应完全肯定也不应完全否定，而应当进行全面的分析和认识。人们不能因为门捷列夫在建立元素周期律上的卓越表现，就以为他永远正确，盲目地跟着他一起去反对科学的电离学说；反之，也不能因为他在电离学说上的错误，就抹杀他在周期律上的功绩，从而否认他是一位伟大的化学家。对于奥斯特瓦尔德也是一样，不能因为他鼓吹了唯心主义的"唯能论"就把他看得一无是处，全盘否定，或认为不是一位杰出的化学家；反之，也不能因为他在电离学说上的慧眼灼识，维护了真理，就看不到

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，32页。

他在哲学上和其它科学问题上的错误，等等。这样，人们就不会对成功的科学家盲目迷信，过分崇拜，也不会对失策的科学家全盘否定，过分贬低，从而能够扬其长，避其短，为我所学，为我所戒，为现实的科学研究工作提供有益的借鉴。

廖 正 衡

（三）化学概念和学说的演变

化学发展的过程，从一定意义上说，主要是化学概念、学说和理论的演化过程。化学中的概念、学说和理论很多，诸如元素、原子、分子、氧化、还原、化合、分解、原子价、亲合力、化学键、原子论、分子论、化学平衡、反应速度、价键理论、分子轨道理论、配位场理论和分子轨道对称性守恒原理，等等，对于它们的演化线索都应当加以追踪和考察。然而由于目前国内对这方面的研究还只是刚刚开始，这里只能先就其中的几个问题做一初步论述，供进一步研究的参考。

1.化学元素概念的发展

从古代元素观念到近代科学的元素概念，再到现代的元素（包括同位素）概念，是化学元素概念的两次重大发展，对化学这门重要的基础科学都有革命性意义。从现代元素概念到核素概念的演变，把现代化学和现代物理学紧密结合起来。核素概念是在同位素概念的基础上发展起来的，但在本质上它已经超出了化学元素的范畴，而成为核物理学的一个重要的基本概念。从现代化学元素周期表到核素图的演变，显示出核素概念的革命意义。

元素的本来意义是物质的基元单位，是世界万物的组成者，即物质统一性的体现者。基元物质（元素）并不基元，它仅仅是人类深入物质层次的认识水平的暂时性界标。化学元素(同位素)——核素——基本粒子，在这样的反映基元物质层次的认识链条中，核素概念起着承上启下的特殊作用。

对上述元素概念的发展和演变问题进行科学的和哲学的分析，有着重要的现实意义和认识论价值。

近代科学元素概念的产生和确立

人类早就有了世界万物组成者的观念。例如，我们中国的“五行说”，古希腊人的“四素说”，但这仅仅是一种天才的猜测，如恩格斯所说的，是“古代人的天才的自然哲学的直觉”，而不是近代科学的概念。

炼金术是化学的前身。欧洲炼金家的元素观念是所谓的“原性说”，认为物质的本原是几种抽象的性质，由这些“原始性质”组合成元素，再由元素生成万物。这种把本来不存在的脱离物质的抽象性质当做第一性东西的错误观念是唯心的。炼金术士的这种唯心观念渊源于亚里士多德。他认为，火、土、气和水四种元素，是由冷、热、干、湿四种基本原性两两组合而成。例如，冷和湿结合成水；热和干组合成火。有的炼金家又加上了几种原始性质，如金属性、可燃性、可溶性等。他们认为，物质属性是第一位

的，物质本身倒是次要的。这种原性观念实质上是神秘的灵魂说的翻版，以此作为指导思想，妄图改变贱金属的“低贱本性”，而给其注入贵金属的灵魂，幻想着“哲人之石”，把铜铁变成金银。炼金术时期的化学不是科学形态的东西，尽管在很长历史时期内炼金工作积累了一些化学知识。

十七世纪下半叶，英国物理学家和化学家波义耳怀疑和批判了有浓厚迷信色彩的原性说。1661年，他的名著《怀疑派的化学家》问世①，攻击的矛头直指炼金术，同时提出了科学的元素概念。他指出，元素是“组成复杂物体和在分解复杂物体时，最后所得到的那种最简单的物体”，“是用一般化学方法不能再分解为更简单的某些实物”；“化学的目的是认识物体的结构，而认识的方法是分析，即把物体分解为元素”。这表明了波义耳的元素观：化学元素是实在的基本物质，不同的元素可以结合成化合物，当元素从化合物之中被分离出来，再不能用化学方法把它分解为更简单的东西了。恩格斯给了波义耳很高的评价，说他把化学确立为科学。

简言之，用化学方法不能再分解的物质基元单位，是波义耳科学形态的化学元素概念的核心内容。显然，这带有很大程度的主观经验性质，确认什么东西是元素往往要凭个人经验。波义耳虽然反对原性论元素观念，但是他仍然保留了炼金家的某些错误。凡是用当时的化学方法还不能分解的东西，就很可能被人们误认为是元素。波义耳仍然相信火是一种元素的古老观念。

化学是借用燃素说的形式从炼金术的桎梏中解放出来的。直到十八世纪下半叶，相信燃素说的化学家还把根本不存在的假想燃素当作化学元素，就是制出氧气的英国人普利斯特列和瑞典人舍勒也不例外。恩格斯评论说：“普利斯特列和舍勒析出了氧气，但不知道他们所析出的是什么。他们为‘既有的’燃素说‘范畴所束缚’。这种本来可以推翻全部燃素说观点并使化学发生革命的元素，在他们手中没有能结出果实。”② 1777年，拉瓦锡创立了氧化燃烧学说，才把氧确认为元素。著名英国科学家卡文迪许曾把氢当做燃素，1787年拉瓦锡才把它列入正式元素行列。在化学上利用氧元素掀起一场革命的拉瓦锡，也难免在辨认元素工作中发生经验主义的错误，1789年，在他开列的共有33种元素名单中就有不少假元素，例如光、热、石灰、氧化镁等。当时大多数化学家认为石灰和镁土是元素，因为无法分解它们。直到1808年，在道尔顿的原子量表中还把它们列为元素。恰好在这年，用电解法从石灰中分离出元素钙，从镁土中分解出元素镁。可见，对元素的确认，在很大程度上取决于化学分析实验的技术水平。

化学元素成为科学概念虽然始自波义耳，但是原子论的化学元素定义更为重要。关于原子，人类也早就天才地直觉到了。中国墨子的“端”，印度哲学家康那德的“不可分割的质点”，以及古希腊唯物主义哲学家德谟克里特的原子论，在思想上是不约而同的，都认为存在着不可再分割的基元物质。但这仍然是天才的猜测而已，即不是近代科学形态的原子概念。

近代科学形态的原子论概念之提出，主要取决于人类对化学现象的定量研究。组成

---

① 1661—1679年间发表的一部三人对话集，书的全名是：《怀疑派的化学家：或化学与物理学上的疑点与矛盾，并及世俗炼金家用以证明盐、硫、汞为物的真正原质的实验》。

② 《资本论》第2卷，20页。

化合物的元素相互之间的定量关系规律的发现，例如定比（定组成）定律、当量（化合量）定律以及倍比定律（实质上还是当量定律），为道尔顿在十九世纪初建立原子论打下了基础[①]。元素化合的定量规律是从科学实验的经验事实中总结出来的，道尔顿的原子学说从理论上科学地解释了这些经验定律，从而将元素和原子的内在联系初步揭示出来。一种元素就是同一种类的原子，不同元素的原子属于不同的种类。同种类的原子在性质上完全相同，不同种类原子的基本区别在于它们的原子量不同。总之，道尔顿建立了元素和原子等同的原子论元素观念，有多少种元素，就有多少种原子。在当时的科学实验和理论思维的水平上，这是了不起的科学成就。我们当然不能用现代科学的元素和原子的区别性概念，更不能用核素概念来否定它。恩格斯评价说："化学中的新时代是随着原子论开始的（所以，近代化学之父不是拉瓦锡，而是道尔顿）"[②]。并称赞道尔顿的成就，是"能给整个科学创造一个中心并给研究工作打下巩固基础的发现"[③]。

道尔顿提出了元素原子量概念，并进行了测定计算工作，发表了第一张原子量表。他采用的元素符号，比炼金术士的元素形象符号有很大改进，可以说是后来拉丁文字母符号的萌芽。他测定原子量的实验根据只是化合物的定量组成，若不确切知道化合物中的原子数，仅按简单比例原则就难免带有主观随意性。例如，他把氧原子量测定错了，结果导致不少谬误，因为许多元素的原子量都是根据其氧化物而测定的。尽管如此，道尔顿的开拓道路的工作应当充分肯定。在他之后，很多科学家致力于这项工作，在十九世纪上半叶成为科学界的迫切问题之一。原子量测定工作的理论设计和方法的不断改进，促使道尔顿的原子论发展成为原子分子论。

瑞典人贝采里乌斯对原子量的测定工作做出很大贡献。他根据合成水的反应，正确地解决了水的组成和氧原子量问题，纠正了道尔顿的错误。把元素拉丁文名称的为首字母作为元素符号的这一简便办法，也是他首创的，并立即得到了公认。元素符号在化学式中则代表原子，这也有助于原子分子论的发展。

测定原子量的工作，是和原子分子论的发展交错着进行的。道尔顿的原子论解释不了盖·吕萨克1808年提出的气体反应体积简比定律。1811年，阿佛加德罗为了解决道尔顿和盖·吕萨克的争论，提出了分子理论。分子概念早在1738年就被瑞士人贝尔奴利提出过；罗蒙诺索夫于1741年也提出过原子分子学说。但是，分子运动学说的分子概念和原子概念混淆不清。阿佛加德罗提供了根据气体密度测定分子量的可靠方法，把原子和分子令人信服地区分开来，在物理学和化学上都做出了很大贡献。原子是化学反应中的最小单位，即原子是化学上不可分割性的体现者；分子（包括单原子分子）是物质可以独立存在的最小单位。或者说，元素的最小单位是原子，化合物（不同元素的原子结合而成）的最小单位是分子。不论是单质分子，还是化合物分子，皆是由原子组成的。科学的原子概念是从元素化合量的研究中抽象出来的，科学的分子概念是从气体性质的定量研究中抽象出来的。阿佛加德罗的分子说是从盖·吕萨克的经验定律出发的，并使它自然地和道尔顿的原子论统一起来。可惜，将近半个世纪，原子量问题还是处于混乱状

---

① 1803年，道尔顿宣读了有关原子论及原子量计算的论文；1808年，他的原子论专著《化学哲学的新体系》一书出版。

② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，269页。

③ 同上，96页。

态，无论谁都难免有自相矛盾之处，标准不一，众说纷纭，以至在1860年的国际化学会议上都无法解决。因此，原子学说和分子理论被人怀疑甚至冷落。正在这个时候，意大利化学家康尼查罗清理了这种混乱局面①，确定了从分子量求原子量的方法，完满地阐明了原子论和分子论，两者作为一个统一的理论才确立下来。

没有分子理论，近代科学的原子理论是不能单独成立的。只有科学的分子概念确立起来，道尔顿的原子概念才得以真正确立，原子论的化学元素概念才能形成。

从波义耳的元素概念到原子分子论元素概念，是近代科学的元素概念产生和确立的过程。这标志着化学作为一门近代基础科学的产生和发展，并为发现化学元素周期律准备了条件。这种概念的科学性当然是相对的，它反映了这个时代的科学水平和认识水平。

现代元素概念及门捷列夫元素概念的地位

现代科学的元素概念是在本世纪三十年代确立的，它深入到原子世界的这样一个程度，即原子核中质子数相同而中子数不同的一类原子，用同位素概念反映了这类原子的异同点。凡是核电荷数（原子序数）相同的一类原子，不论它们在中子数方面的差异，在化学元素周期表中均占同等的地位，即是一种化学元素的现代规定性。这种新的元素概念冲破了近代科学的元素与原子等同的旧观念，同一种元素可以包括不同的原子。

苏联哲学家凯德洛夫认为门捷列夫的元素概念属于新的现代元素范畴，并命名为门捷列夫概念②。这是值得商榷的。

门捷列夫和迈尔几乎同时彼此独立地发现了化学元素周期律，具有非常伟大的意义。但是，我们不能因此而把他们的元素概念算作新的范畴。事实上，他们的化学元素观念并没有什么重大的改变，仍然属于近代科学元素概念的范围。如果说，元素周期律的发现预示着旧元素概念将被新元素概念所取代，这是恰如其分的。预示着新观念产生是一回事，新观念究竟是否产生了，则是另一回事。

从十七世纪中叶波义耳时代至十九世纪末的两个半世纪，经验主义的旧元素观念占统治地位，认为元素是彼此独立无关的，不能互相转化，原子不能分割，元素和原子等同，每一种元素的一切原子都是一个样的。显然，这种旧观念有主观主义的成分，在判断元素问题上，有使客体取决于主体的倾向，即使元素依赖于人类的分解技术水平。但是，我们不能因此而把它完全归结为主观主义的，不能断言说它不反映化学元素的任何客观性质。前面提到，波义耳、拉瓦锡等都误认过元素，即把主体（化学家）的能力局限性强加于客体，应当指出这是错误的，但不能因此而不承认他们所判断的元素多数还是准确的。旧的带有形而上学性质的化学元素观念有一定程度的合理性，旧的带有主观主义色彩的化学元素定义还是反映了化学元素的某些客观性质。如果说波义耳的元素概念完全是主观主义的，他怎么能够把化学确立为科学呢？如果说拉瓦锡的元素观念完全是形而上学的，他又如何能够在化学中掀起一场革命呢？我们不能为了把门捷列夫元

① 1860年在德国卡尔斯鲁厄召开的第一次世界化学家代表大会结束时，康尼查罗散发了自己的论文《化学哲学课程大纲》，及时被公认。

② 〔苏〕Б.М.凯德洛夫：《化学元素概念的演变》，科学出版社，1985年。

素概念算作新范畴而把旧元素概念完全归结为主观主义的。同理，我们也不能因为门捷列夫周期律的客观性质而否认门捷列夫元素观念中有主观主义的因素。

十九世纪末二十世纪初开始的自然科学的革命冲破了许多旧有的保守观念，其中包括门捷列夫的化学元素概念。

电子的发现和放射性元素的研究，打破了原子不变和元素不变的形而上学观念，元素（原子）不是物质的最终的基本单位，电子是亚（次）原子粒子，原子是可以破坏的。科学家们纷纷用最新的发现来解释物理、化学现象，例如，用电子脱离掉原子的新观念来解释光电效应；用自由电子新理论来描写金属导电；用电子的行为来说明化学元素的价键；还有人提出用铀矿中含的铅量和铀的衰变速度来测定地球年龄，等等。更为重要的是，物理学家和化学家纷纷设想和探索原子的结构。

近代科学的原子说确立了一个世纪，但是不能证明单个原子的存在，只能对数以亿万计的原子集团进行统计处理。利用放射性能够探索单个α粒子的效应和行径了。利用威尔逊云室法和磁场偏转法可以间接感知原子的存在和原子的转化。电子真实质量的数量级（10^{-28}克）也被揭示出来了。

面对科学的新时代之开始，处于新旧观念交替时期的门捷列夫的思想非常矛盾。他害怕电子"会使事情复杂化"，唯恐元素转化的事实会动摇"整个世界观的基础"，他所说的世界观就是元素不变的自然观。他的思想矛盾由来已久，本来是正常的，他不能进一步解释元素周期律，他的同时代人都不能解释。化学元素的性质为什么按原子量递增的顺序呈现周期性变化？为什么仅有少数例外破坏了这顺序？元素之间的内在联系究竟是什么？门捷列夫时代的人困惑不解，周期律和周期表还是个谜。这不是某个人的局限性，而是整个时代的局限性，因为当时的社会实践还没有提供揭示这个"谜底"的客观条件。门捷列夫早就想到了元素周期律可能与原子结构有关。但是，当科学的新发现日益显示出原子的复杂结构的现实性时，门捷列夫却反对把元素周期律和物质结构问题联系起来，问题就出在这里。在发现电子的第二年，发现放射性的第三年，即1898年，他还特别强调化学元素的独立性，并以此作为"一切科学的基础"，反对元素之间可以相互转化的进步观点。在他逝世的前一年，即1906年，他还不相信放射性元素的衰变事实，把元素的放射性和元素的磁性相提并论，在该年印行的他的名著《化学原理》第八版中可以找到这种保守看法。在这一点上，我们是有理由责怪门捷列夫的，尽管和他持同样落后观点的还有著名的科学家凯尔文[2]。应当公正地指出，在门捷列夫的落后思想中也有矛盾性，有时他还指望元素转化的事实会揭示周期律的本质，不过这种进步的思想闪光是微弱的，此时已不占主导地位。总的看来，在近代自然科学向现代自然科学开始大转变的时期，门捷列夫处于守旧的地位，他的元素观念受到了冲击，但是他没有跟上潮流，这是事实。他当年大胆预言新元素的存在和修改公认的元素原子量的勇敢气魄与其晚年的胆小怕事的守旧形象形成了鲜明对比。这是可以理解的，他担心新的科学发现很可能会冲垮自己的理论体系，因而忧心忡忡；同时他又忐忑地希望新

---

① 1898年，门捷列夫著文揭露一位美国人把白银变成了黄金的骗局，这当然是对的，但他借此发挥元素不变性的观点则是错误的。

② 凯尔文即W.汤姆生。

③ 这种思想也是在1898年驳美国人的文章中透露的。《门捷列夫选集》俄文版第2卷，1934年，440页。

的实践或许能够解决他的旧元素观点回答不了的问题。但是，他害怕的思想大大超过了自己要前进的愿望。再加上年迈，因而他的思想显得保守甚至有些停滞，跟不上时代的步伐。正在物理学这个科学尖兵带领着整个科学发生深刻的革命之际，正当原子物理学和核物理学将要揭示原子序数和周期律的本质，从而形成现代元素概念的前夜，门捷列夫在痛苦的思想矛盾中逝世了。

现代科学的元素概念和同位素概念可以说是等价的。发现同位素之后，才促使人们抛弃了元素和原子等同的旧观念，认识到元素的原子量和同位素的质量数既有联系而又有区别；三十年代上半期发现中子，原子核的结构被初步认识，同位素的本质才被了解，现代科学的元素定义才算最后建立起来。由此看来，即使门捷列夫跟得上时代的步伐，树立了元素可以转化、原子可以分割的进步观点，他也根本不可能产生同位素的概念，更不可能揭示同位素的本质，因而不可能有现代元素概念。

根据上述理由，可以看出，门捷列夫的元素概念不属于现代科学元素概念的范围。虽然他说过，“化学理论学说的全部实质就在于抽象的元素概念”。“化学……可以称为关于元素的学说”①。但这并没有超出波义耳的论点，只不过比波义耳说的更明确更简炼罢了。我们当然不能以此作为根据来证明门捷列夫的元素概念属于新范畴。

现代科学的元素定义，已经消除了旧元素定义中的主观主义成分。在把原子和元素等同起来的观念中，元素被定义为性质、质量完全相同的一类原子，或用凯德洛夫的话说，“每一种元素的一切原子绝对地互相同一”。这里的主观主义因素只有在同位素发现之后才成为显而易见的东西。可见旧元素定义中的主观主义的成分是受时代条件局限的，门捷列夫时代的人不可能跳出这个圈子。现代元素定义的主观辩证法是客观辩证法的如实反映，概念的内涵和外延同时增大，是正比关系，即对原子（客体）本身，我们认识的深度和广度都增加了。现代元素概念的辩证运动正在进行着。

从现代元素概念到核素概念的演变

（1）原子量概念的演变

当人类不知道原子核是由质子和中子结合成的时候，元素和原子的概念自然是等同的，即元素的种类数代表原子的种类数。某元素的原子量，就是一种原子的相对质量；某元素的真实原子量也就是一种原子的真实质量。元素的原子量和元素的相对原子质量是同义语；元素的真实原子量与元素的真实原子质量是一回事。有了同位素概念之后，元素的原子量概念发生了明显的变化，它是该元素的天然同位素按不同的百分比所组成的一个“假想原子”的“平均”相对质量，因此这种原子量并不是一种原子的相对质量，而是多种原子按不同比值而拼凑成的一个并不真实存在的“原子”的相对质量。当然，如果“只有一种天然同位素的元素”这种叫法我们暂时认为是可以的话，那么该元素的原子量就是一种原子的相对质量。例如，钠元素只有一种天然同位素 ^{23}Na，即质量数为23的钠原子，钠元素的原子量就是一种钠原子的相对质量。只有在这种情况下，元素的真实原子量或原子的真实质量才有意义；有两种以上天然同位素的元素的真实原子量或原子的真实质量则没有意义，因为由两种以上的真实原子所拼凑成的一个“假想

① 《门捷列夫选集》俄文版第2卷，1934年，256、134页。

原子”并不真实存在。

元素的原子量和天然同位素的质量数是两个不同的概念。同位素的相对质量数是正整数，元素的相对原子量一般则带小数，或称分数原子量。元素通常是两种以上同位素的混合物，即同一元素的不同质量的原子（同类不同种的原子）按不同的丰度组成天然元素，它的原子量带小数之谜已被解开。在元素周期表中，对于按原子量递增的顺序来说的那些反常的“倒置情况”，即门捷列夫遗留下来的老大难问题至此迎刃而解。随着元素原子序数的递增，原子的质子数递增，一般说来，中子数也递增，因此总起来表现为原子量的递增。那些反常的元素显然是因为含中子数多的同位素的自然丰度大（或者含中子数少的同位素的自然丰度大）所造成的。例如，氩元素有三种稳定同位素，质量数是40的氩原子占99.59%，质量数是38的氩原子占0.063%；质量数是36的氩原子占0.337%。氩元素的三种氩原子的“平均”原子量是39.948，自然是由含22个中子的氩原子的自然丰度最大所致。钾元素也有三种天然同位素，质量数是39的钾原子占93.3%；质量数是41的钾原子占6.7%；质量数是40的钾原子占0.0118%。钾元素的原子量是39.0983，当然是由含20个中子的钾原子比例数最大所致。结果，19号元素钾的原子量反而小于18号元素氩的原子量。同理，钴和镍、碲和碘以及后来增加的钍和镤、铀和镎这几处的原子量反而减小的情况都得到了说明。

对于元素而言，同位素是复数概念。如果说“某元素只有一种天然同位素”，这种表述方法本身就有严重的逻辑混乱，即把同位素作为单数概念来使用显然是错误的，那么引入一个核素（Nuclide）概念，说“某元素只有一种天然核素”这种表述本身则没有毛病了。只有一种天然稳定核素的元素达20种之多，它们是：^{9}Be、^{19}F、^{23}Na、^{27}Al、^{31}P、^{45}Sc、^{55}Mn、^{59}Co、^{75}As、^{93}Nb、^{103}Rh、^{127}I、^{133}Cs、^{141}Pr、^{159}Tb、^{165}Ho、^{169}Tm、^{197}Au、^{209}Bi、$^{232}_{90}Th$①。

“原子质量”若不冠以相对两字，则不是元素原子量的同义语了，而是指特定原子的质量。有了核素概念，原子质量和核素的质量数这两个概念是等价的。同位素的质量数可以用核素的质量数来取代。

核素概念可以正确表述元素的原子量、元素的同位素，元素和原子的关系等问题。核素概念最初引入时就是为了描述元素的原子量问题的，因此常把它作为元素的形容词来使用，例如，我们可以说“单一核素的元素的原子量”、“多核素的元素的原子量”。元素的原子量概念通过同位素的质量数概念演变成了核素的质量数概念。事实上，元素的原子量概念已经不能正确反映原子质量问题了。原子（实质上是原子核）的质量数和元素的原子量是两个有原则区别的概念，用核素质量数概念来代表原子的质量数和同位素的质量数是原子量概念演变的必然趋势。我们在化学元素周期表中看到，人造元素的原子量概念已经没有什么意义，所列质量数都是正整数，并且用括号括起来，这是该元素半衰期最长的同位素原子（核素）的质量数。从94号元素钚至目前仍有争议的107号元素都是这样②。$^{244}_{94}Pu$放在$^{243}_{95}Am$的前面，这已经不是原来意义上的“倒置情况”，即无所谓按原子量递增的顺序来考究了。在94号元素之前，还有几位放射性元素

① ^{209}Bi的半衰期大于200亿亿年，^{232}Th的半衰期是140亿年，因此可以把它们算作稳定核素之列。

② 1971年在地壳矿物中发现了^{244}Pu，是现今在地球上找到的质量数最大的核素。

的原子量失去了意义，它们是：锝、钷、钋、砹、氡、钫，也只列半衰期最长的核素的质量数。

同位素的质量数好象把元素的原子量“拆开”，重视单个原子的质量数，实质上是重视单个原子核的质量数，核素概念的诞生是元素原子量概念演化的必然结果，但核素的意义远比这广泛而且深刻得多。

（2）人造元素概念的演变

本世纪三十年代后半期，人工（通过人为的核反应）制得第一个所谓“缺失元素”锝，从而产生了人造元素的概念①，其原意是自然界（起码是在地球上）不存在的元素，同时也产生了与此相对应的天然元素概念。后来，在自然界找到了锝，它当然就不属于人造元素范畴了。超铀元素镎和钚原是两位享有盛名的人造元素，因在自然界找到了它们的同位素，尽管非常痕量，也不算人造元素了。我们在最新周期表中看到，95号至107号元素都有人造的标记。关于天然元素和人造元素的这种划分方法是很粗糙的，人造元素概念已经不能比较好地反映丰富多彩的人工原子核的事实了。

人造元素的本质就是人造自然界不存在的原子核。事实上，早在人造元素概念产生之前，人类已经制造出了天然元素所没有的同位素，即人工放射性同位素。由此看来，就人造元素的本质意义来说，早在1934年著名的约里奥·居里夫妇就开始了人造元素的工作，他们用α粒子轰击硼核或铝核而分别得到氮、磷的人工放射性同位素（质量数为13的氮核、质量数为30的磷核），从此开始了大规模的自然元素的人工放射性同位素的研制事业。几乎所有的天然元素都有了人工同位素，其数量远远超过了天然的同位素。至今，人工制造的原子核近1600种，在地球上天然存在的原子核仅有近340种。有人从理论上估算，在实验室可以观察到的原子核约有六千种，这是否正确？有待实践检验。无疑的，人工原子核的数量还要继续增加。人造元素的概念向人造原子核概念演变的趋势是必然的。

人造元素的科学实践，揭示了同核异能态现象，即具有相同的质子数和中子数的“同一原子核”却具有不同的性质（衰变方式及其半衰期、能量等不同），好象是原子核这个层次的“同分异构体”，在这里“同分”系指相同数目的质子和中子，“异构”则表明核子构成原子核的结合方式不同。不仅人造原子核有异能态，而且天然原子核也有异能态。据统计，现在已知三百零六种原子核有异能态，其中十三种原子核有两种异能态。显然，现代同位素概念已经根本不能概括这些复杂的同核异能态现象了。“具有同核异能态的元素”这种表述根本不通，必然代之以“具有同核异能态的原子核”这种说法。

至于人造异常原子和人造反原子核②，用人造元素概念就更难概括了。

人造核素概念和人造原子核概念是等价的。用人造核素概念来取代人造元素概念，

---

① 揭示了原子序数和同位素的本质，也就初步揭示了化学元素的内在联系，表明周期表是元素的一个完整体系。至1925年，在1—92号元素之间还有四个空位（43、61、85、87），即是所谓缺失元素。

② 异常原子是广义化的原子系统，可以把任何一个结合在一起的正负粒子系统（靠电磁相互作用）视为原子体系。例如人工π原子，即用负π介子代替正常原子体系中的电子角色，还有人工μ原子、超子原子、反质子原子等。

人造反原子核，例如，由反质子和反中子结合成的反氘核；由两个反质子和一个反中子结合成的反氦核（反氦-3）。

则比较完满地反映了人造原子核的内容。同理，用天然核素概念比用天然元素概念更确切，每一种天然元素都有人工放射性同位素，只有用核素概念才能区分天然核素和人工核素。可以用人造反核素概念来反映人造反原子的事实。如果在自然界真的发现了人类所预言的反原子，则可以叫做天然反核素。关于人造异常原子，是否可以叫做人造异常核素？这牵扯到原子概念和核素概念的关系问题。

（3）原子概念的演变

元素的化学性质和原子的电子壳层结构密切相关，因此化学元素（同位素）概念和原子概念不可分割。我们知道，原子系统的化学稳定性取决于原子核外电子壳层结构的稳定性。例如，稀有气体元素的化学稳定性是由核外电子的闭壳效应决定的。当然，这种闭壳效应并不是绝对的，在一定条件下可以打开，因而有惰性元素化合物存在。原子系统的化学稳定性和原子核的稳定性是两个有原则区别的概念，因为本质不同。我们说放射性元素，是指核的不稳定性而言。化学性质非常稳定的元素，其放射性可能很强，例如氡。如果我们笼统地说某种稳定元素，究竟是指原子的稳定性还是原子核的稳定性呢？这本来是不明确的。通常所说的稳定元素是针对放射性元素而言的，即和非放射性元素概念等价，但这种习惯上的明确性并不等于概念上的确定性。因此，稳定元素、稳定原子概念应当被稳定核素概念取代。

衰变方式和半衰期是特定原子核的属性。显然，我们不能说“元素的半衰期”。每一种元素往往有许多放射性同位素（大多数是人造的），它们的半衰期不同，甚至同一种原子核的半衰期也不一样。若说“原子的半衰期”、“具有同核异能态的原子”，这也不确切。原子概念和核素概念在某些情况下有人等同使用，例如，说某种元素有多少种同位素原子，和“有多少种核素”这种称法可以对换；人造核素与人造原子也可以相通。因为，核素可以描写特定原子。在这初级本质意义上来看，可以把人造异常原子称为人造异常核素。但就进一步的本质而言，核素是代表特定原子核的，元素的寿命、原子的寿命实质上是原子核的寿命，即核素的半衰期统计性概念。

在特殊条件下，元素、原子的“化学区”（即电子壳层结构）退化、甚至崩溃了，换句话说，原子系统变成了核系统。这时原子概念不适用了，核素概念是否有效呢？我们暂时承认科学家的一种假说，即地球的地核是铁镍核心，铁、镍原子在超高压条件下已经不是正常的原子系统，我认为是可以用核素概念来概括的。如果把正常原子系统视为一般条件的核素，原子系统崩溃的核系统则可以称为特殊状态下的核素。

以上从三个角度论述了化学元素概念、同位素概念和原子概念向核素概念演变过程的必然性。质子数相同而中子数不同的原子（同位素）概念仍然属于化学元素范畴，是同一化学元素的意思，但它们是不同的核素，而不能说是“不同的同位素”。核素的序数和元素（同位素）的原子序数是一致的，因此，核素是元素（同位素）概念的进一步演变，反映了人类从原子系统向核层次的深入认识。核素主要是表示不同原子核的概念，不同的核素就是不同的原子核。同样的原子核而有不同的核性质则是同核异能态的核素。用稳定核素、天然放射性核素、人造放射性核素概念来取代稳定元素、天然放射性元素、人造放射性元素，是科学的进步。

可惜，还没有人在科学上和哲学上论证核素概念以及核素图有独立存在的价值。现在很多科学家和哲学家认为，有同位素概念就行了，用不着令人费解的核素概念。核素

在本质上是代表原子核的，这是大家公认的，因此人们说核素就是原子核，虽然核素不同于同位素概念，但是从原子核的层次来看，它没有独立存在的价值。其实，同一原子核可以是不同的核素，仅凭这一点，原子核概念就不能等同核素概念。在化学上，同分（原子的种类和数目一样）而异构（这些原子结合成分子的结构方式不同）者，是不同的化学物质。因此我认为，在核层次上的同分异构体是不同的核素物质。目前，人类还不知道核子"异构"的真实情况。

恩格斯在《自然辩证法》导言里说过，"通过光谱分析证明了宇宙物质的化学上的同一性"。

十九世纪中叶以前，人类还不可能用实验手段来判断天体上的物质成分是否和组成地球的化学元素相一致，只好凭猜测，有人说一样，有人则否认。1856年，法国哲学家孔德（Auguste Comte，1798—1857）断言，"天体的化学成分是永远也不可认识的"。1859年，德国科学家本生（R.W.Bunsen，1811—1899）和基尔霍夫（G.R.Kirchhoff，1824-1817）开始用光谱分析方法研究太阳的元素组成，从化学元素的特征光谱线证实地球上的许多元素（诸如氢、氧、碳、铁、钠、钙等），在太阳上也有。关于宇宙物质具有化学元素同一性的理论得到初步证实，孔德的不可知论站不住脚了。1868年，在太阳光谱中发现了氦，此后二十多年，绝大多数科学家和哲学家认为这是一个假定的元素，不论谁也拿不到它，只有在太阳上才有，称之为太阳元素。1895年，终于在地球上找到了氦。还有一个曾被认为是太阳上所特有的元素"氪"，1941年证明是误认，铁、镍、钙等元素在高度电离时产生的禁线就是日冕光谱里的特殊谱线。另外，曾被认为是气体星云所特有的元素"氢"也是误认，早在1927年就证认星云光谱中的绿色谱线是氧离子（O^{++}）发出的。至今，没有发现天体上有哪种化学元素是我们地球上所没有的。宇宙（当然包括地球）物质在化学元素上的同一性是对世界统一性原理的强有力的支持。

谈论世界统一性原理的新发展，人们往往忽略物理核素的同一性问题。我认为有必要强调，从化学元素的同一性到物理核素的同一性的进步是不可忽视的。从化学元素（包括同位素）概念到物理核素概念的演变，从化学元素周期表到物理核素图的演变，是在更深的物质层次上对世界统一性原理的有力支持。在这种转变中，人造核素的工作起了关键作用。现在已知核素近两千种，其中绝大部分是人造核素，天然存在的核素仅有三百多种。

人们往往从元素层次一下子跳到基本粒子层次来论证物质世界的统一性问题。我认为，作为人类认识界标的"基元物质"层次以及反映其规律性的周期性图表形式，可以用这样的链条加以概括：元素周期表→"核素周期表""→基本粒子周期表"→？当然，现在只有元素周期表是成熟的东西，其它均在探索阶段。但这并不妨碍我们从物理核素的同一性进而谈论基本粒子的同一性。

核素是基本粒子的"大本营"，探索核素规律，必然牵扯到基本粒子问题。我们今天在近两千种核素和数百种基本粒子面前，好象门捷列夫当年在数十种化学元素面前一样，极需理出一个头绪来，这方面的工作成果将大大丰富世界的统一性理论。

总之，从元素到核素的概念发展，又是具有重要意义的革命性飞跃。和元素概念相适应的是化学元素周期表，它已经不能令人满意地表达丰富多采的核素内容了，特别是

人造核素的成就，要求有一个与核素概念相适应的表达形式。把所有已知的核素，不管是天然的，还是人造的，按原子序数和质量数递增的顺序排列起来，得到了原子核排列图，简称核素图。质量数相同的核素按纵队排列，从上到下的直列是同量异位核素的队伍；将同位核素按质量数递增的顺序依次从左上向右下斜队排列，是质子数相同的核素行列，两者密集在一起（因为采用正六边形图象而彼此紧挨着），从左下至右上（反过来说也一样）的斜队是同中子异荷素[①]。

核素图是在元素周期表的基础上进一步发展起来的。与核素概念一样，它有独立存在的价值，侧重描绘原子核的性质（衰变方式、半衰期、热中子反应截面、射线性质和能量等），而忽略了核外电子壳层结构。核素之间有没有周期性的规律呢？建立在核子壳层结构模型基础上的幻数核素理论，初步显示了核素图有可能发展成为核素周期表，并预言了超重核素的存在，核物理学家们想用重离子加速器人工合成超重核素，同时也努力在自然界寻找。现在，人们常常说自然科学正在面临着“重大突破”，我们认为，超重核素问题就是这种重大“突破口”之一。这里所说的突破有双重含意：或者发现了一系列呈现周期性的超重核素；或者导致核结构理论的重大变革。

在原子核中，质子和中子在自然地相互转化着。核素的稳定性和现实性主要取决于中子和质子的一定结合方式，核子之间的相互关系是极其错综复杂的。质子和中子不仅交换π介子，而且交换其它基本粒子，通过这些交换而形成原子核。因此可以把原子核视为各种基本粒子的集团，它们是潜在性的。在人造核素过程中，各种基本粒子的相互转化的许多奥妙人类还没有认识。对于作为人类认识界标的“基元物质”层次以及反映其规律性的周期性图表形式，我们的研究工作还远远没有完成。

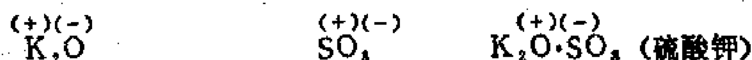
核素规律，上联元素规律，下接基本粒子规律。核素概念的确立，对认识和进一步探索这三者之间的联系和区别，具有不可否认的价值。

解 强

2. 原子价概念的发展

历 史 的 回 顾[②]

原子价或化合价（Valence）是化学中最重要的概念之一，但迄今仍缺乏严格的定义。通常原子价有两种意义。第一种意义泛指分子中原子间的相互作用。在这种意义上，原子价概念的提出应追溯到瑞典化学家 Berzelius（1779—1848）。他在1812年发表了著名的“二元学说”。根据这个学说，任何元素可分为正负两种，每一化合物都是由电性相异的两部分所组成，例如：



这种意义上的“原子价”，后来发展为化学键理论。例如著名量子化学家C. A. Coulson写的《Valence》一书，其含义就是化学键理论。

原子价的第二种意义是我们现在通常理解的原子价。在这种意义上，原子价概念的

① 见原子能出版社1976年版核素图。我国学者目前正在探索一种新形式的“公式”核素图，可望在近期内取得成果。

② L.Pauling, J.Molecular Science（分子科学学报英文版），2（4），1（1982）。

提出应追溯到英国化学家E. P. Frankland（1825—1899）。他在1852年提出：金属或其它元素的每一个原子在化合时具有一种特殊的性质，叫做“饱和能力”，即倾向于和一定数目的其它原子相结合。德国化学家F. A. Kekulé（1829—1896）和 A. W. H. Kolbe以及英国化学家A.S.Couper（1831—1892）发展了Frankland的见解，把各种元素的化合力以“原子数（Atomigkeit）”或“亲合力单位（affinity unit）”来表示，并认为碳的“原子数”等于4，不分正负。接着Kekulé在1858年提出碳键学说，即碳原子与碳原子可以互相结合，形成链状。在1865年又提出芳香族化合物中具有环状结构，并注意到有单键、双键和三重键。俄国化学家 A.M. Бутаеров（1828—1886）则在1861年创立了著名的“化学结构理论”。1864年德国化学家J. L. Meyer（1830—1895）建议以“原子价（Valence）”这一术语代替“原子数”或“亲合力单位”。以上这些开创性的工作，为有机物的价键理论奠定了基础。

问 题 的 提 出

1973年版英国百科全书①对原子价所下的定义是：“化学中的原子价是一种元素的性质，它决定该元素的一个原子与其它原子化合的能力。”……为了对原子价的性质有更清楚的了解，原子价这一概念已分裂为下列几个新概念：（1）共价（covalence），（2）离子价（ionic valence），（3）配位数（coordination number），（4）氧化值（oxidation number or oxidation state）等。

L.Pauling在他1975年版的《化学》②中为共价所下的定义是：“一个元素的共价是指它的一个原子和其它原子形成的共价键数”。Pauliug的定义在有机化学中是适用的，但在无机化学、金属有机化学和原子簇化学中计算金属元素共价时，常常会遇到困难。问题是如何确定共价键数。单键、双键、三重键的共价键数依次等于1、2、3，这是没有问题的，但配键的共价数是否等于1？π配体络合物如二苯铬、二茂铁中金属原子的共价应如何计算？例如在下列化合物或络离子中金属原子的共价等于多少？

（1）$HMn(CO)_5$	（2）$H_3Mn(CO)_4$
（3）$H_5Re(PR_3)_3$	（4）$H_7Re(PR_3)_2$
（5）$(K^+)_2(ReH_9^-)$	（6）$Mn_2(CO)_{10}$
（7）$Mn_3(CO)_{14}^-$	（8）$Os_5(CO)_{16}$
（9）$Os_6(CO)_{18}$	（10）$Os_6(CO)_{21}$
（11）$Os_7(CO)_{21}$	（12）$FeCo_2(CO)_9S$

在无机化学和金属有机化学中，金属原子的原子价通常是指它的氧化值。作者在探讨原子簇化合物的结构规则和（nxcπ）数的基础上③、④，提出共价的新定义⑤它对

---

① Encyclopaedia Britanica, 22, p.847(1973).

② L.Pauling and P.Pauling, *Chemistry*, p. 141(1975).

③ 徐光宪，*The Proceedings of the Second China-Japan USA Symposium on Organometallic and Inorganic Chemistry*, Shanghai, June p. 101(1982).

④ 徐光宪：“原子簇与有关分子的结构规则Ⅰ.（nxcπ）格式”，《高等学校化学学报》1982年第3期，专刊，114页。

⑤ 徐光宪：“原子簇与有关分子的结构规则Ⅱ.共价的新定义”，《分子科学与化学研究》1983年第2期，43页；Journal of Molecular Science, 1, 11(1983).

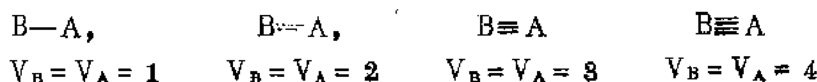
阐明无机化合物和金属有机化合物的结构有一定作用，并能预见许多可能生成但目前尚未见报道的新化合物。现在介绍如下。

共 价 的 新 定 义

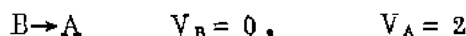
（1）定义Ⅰ

分子中某一原子A^j的共价V可定义为它在形成分子时所接受的共享电子数，因此对于各类共价键，可以按照所接受电子数的多少，规定原子的共价如下：

①普通的共价单键、双键、三重键和四重键



②配价键（dative bond or coordinate covalent bond）

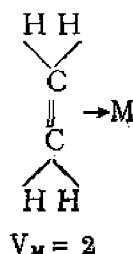


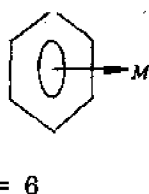
这是因为形成B→A配键的过程中，原子A接受2个电子，而原子B并不接受电子。

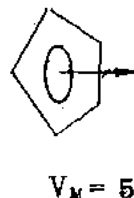
③三中心双电子键（3c—2c bond）



④$\eta^x-\pi$配键







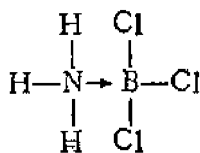
$V_M=2$　　$V_M=6$　　$V_M=5$

（2）定义Ⅱ

分子中某一原子A^j的共价V_j可表示为

$$V_j=n_1+2n_2+0.5n_3+xn_4+q \qquad (1)$$

式中n_1、n_2、n_3、n_4依次表示该原子与邻近原子形成的共价键、配价键（只计算接受电子的原子）三中心双电子键（对边上的原子算半个键）和η^x配键的数目，q为A^j所带的负电荷。例如



$V_N=3$，$V_H=1$，$V_{Cl}=1$，$V_B=5$

（3）定义Ⅲ

在反磁性分子中的某一原子A^j的共价可由下式表示：

$$V_j=2\ (NVO)_j-j \qquad (2)$$

即原子的共价V等于它的价轨道层中的空位数。式中j是原分A^j所含的价电子数，$(NVO)_j$是它的价轨道数。

如果单核络合物的中心离子（或原子）含有s个自旋未配对的电子，则（2）式应改为：

$$V_j = 2\ (NVO)_j^{-j-} \qquad (3)$$

对于包含多中心缺电子键的分子，定义Ⅲ不适用。

（4）举例

①在$HMn(CO)_5$中，Mn原子从H接受1个电子，从5个CO配体接受$2\times5=10$个电子，所以Mn是11价。由定义Ⅱ的（1）式得

$$V_{Mn}=n_1+n_2=1+2\times5=11$$

由定义Ⅲ的（2）式，因Mn价轨道数＝9（d^5sp^3）

$$V_{Mn}=2\ (NVO)_j-j=2\times9-7=11$$

②在$H_3Mn(CO)_4$中，Mn原子从3个H接受3个电子，从4个CO配键接受$2\times4=8$个电子，所以Mn也是11价。由以可见，1个配键可被2个共价单键所取代，这说明把配键的共价作为2是合理的。

③在$H_5Re(\leftarrow PR)_3$和$H_7Re(\leftarrow PR_3)_2$中，Re都是11价。在$ReH_9^{=}$中，Re从9个H接受9个原子，此外它又带有2个负电荷，所以Re仍为11价。这和定义Ⅲ的（2）式$V_{Re}=2\times9-7=11$是一致的。另一方面我们也可以说，$Re^{=}$离子的共价等于9，因为它从9个H接受9个电子。由（2）式，$V_{Re^{=}}=2\times9-9=9$，也得到同样的结果。

④在三氢二茂钽（H_3TaCp_2）分子中，Ta原子从每一个氢原子接受一个电子，从每一个茂环接受5个电子，根据定义Ⅰ，它的共价$V_j=3\times1+2\times5=13$。由定义Ⅱ的（1）式，$n_1=3$，$n_4=2$，$x=5$，所以$V_j=3+2\times5=13$。由定义Ⅲ（2）式，$V_j=2\ (NVO)_j^{-j}=2\times9-5=13$。

⑤在络离子$Cu(NH_3)_4^{++}$中，Cu^{++}从每一个配体NH_3接受2个电子，所以由定义Ⅰ，$V_j=2\times4=8$。由定义Ⅱ的（1）式，$V_j=2n_2=2\times4=8$。$Cu(NH_3)_4^{++}$含有一个自旋未配对电子，所以采用定义Ⅲ时要用（3），即$V_j=2\ (NVO)_j^{-j-s}=2\times9-9-1=8$。

⑥同一原子在不同的分子中，由于采用的价轨道数不同，可以有不同的原子价。例如：PCl_3中的P，采用sp^3轨道所以$(NVO)_j=4$，$V_j=2\times4-5=3$。但在PCl_5中，P采用sp^3d轨道，$(NVO)_j=5$，所以$V_j=2\times5-5=5$。

又如镧系原子Ln在LnR_3（R表示烷基）中采用sp^2，所以$V_j=2\times3-3=3$。在$LnCp_3$（Cp表示环戊二烯基C_5H_5）中，Ln采用d^5sp^3，所以$V_j=2\times9-3=15$。

表2.1列出某些过渡金属原子的共价，它对确定金属有机化合物和原子簇的组成和结构是十分有用的。但原子簇是相当复杂的分子，直接应用原子的共价来讨论结构，不够简便。作者提出把原子簇及有关分子看作由分子片（molecular fragment）所组成，引入“分子片的共价”这一新概念，用于讨论分子价之间的结合方式，就非常方便了。

分子片的共价

（1）分子由分子片组成

数以百万计的有机和无机分子，均可看作是由分子片M^i，有时候还有若干桥联配体L^i所组成（图2.1）：

表2.1 部分过渡金属原子（或离子）的共价

周期表中族号	原子 A	价电子数 j	价轨道数 (NVO)j	共价 Vj	举例
ⅢB	Sc	3	3	3	ScH_3，ScR_3，$ScPh_3$
	Y	3	3	3	YPh_3
	Ln	3	3	3	$LnPh_3$
	Ln	3	9	15	$LnCp_3$
	Nd^{3+}	0	9	18	$Nd(H_2O)_9^{3+}$
ⅣB	Ti	4	4	4	$TiCl_4$
	Ti	4	8	12	Cp_2TiCl_2
	Ti	4	9	14	$Cp_6Ti_6O_8$
ⅤB	Ta	5	9	13	H_3TaCp_2 $Cp_2Ta(CH_2)(R)$
ⅥB	Cr	6	5	4	CrR_4
	Cr	6	9	12	$Cr(C_6H_6)_2$，$Cr(CO)_6$
	Mo	6	6	6	$Mo_2(CH_2SiMe_3)_6$
	Mo	6	9	12	H_2MoCp_2
ⅦB	Mn	7	9	11	$HMn(CO)_5$，$Mn_2(CO)_{10}$
	Mn	7	9	10	$MnCp_2$(Mn含有1个未配电子)
	Mn^{++}	5	9	12	$Mn(H_2O)_6^{++}$
	Re	7	9	11	$HReCp_2$，$H_5Re(PR_3)_3$
ⅧB	Fe	8	9	10	$Fe(CO)_5$，$FeCp_2$，$Fe_2(CO)_9$，$Fe_3(CO)_{12}$，$Fe_5(CO)_{15}C$，$Cp_2Fe_2(CO)_4$
	Fe^{++}	6	9	12	$Fe(H_2O)_6^{++}$
	Os	8	9	10	$H_4Os(PMe_2Ph)_3$
	Co	9	9	9	$CO_2(CO)_8$，$CO_4(CO)_{12}$
	Co^{3+}	6	9	12	$CO(NH_3)_6^{3+}$
	Ni	10	9	8	$Ni(CO)_4$
ⅠB	Cu	11	9	6	$Cu(SPMe_3)_3$
	Cu^{++}	9	9	8	$Cu(NH_3)_4^{++}$
	Ag^{+}	10	7	4	$Ag(NH_3)_2^{+}$
ⅡB	Zn	12	7	2	ZnR_2，$ZnPh_2$
	Zn^{++}	10	9	8	$Zn(NH_3)_4^{++}$

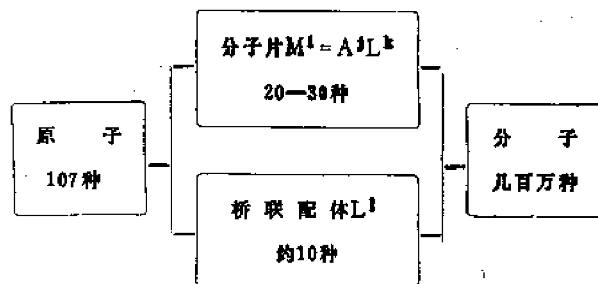


图2.1 由原子组成分子片再组成分子的示意图

分子片M^i是由中心原子A^j和若干配体L^k所组成，i是分子片所含的价电子数，其计算方法详见165页注④。

（2）分子片的共价

分子片M^i的共价V_i可定义为它的价轨道层中的空位数，即

$$V_i = 2\ (NVO)_i - i \qquad (4)$$

表2.2列出一些典型的分子片的共价。

表2.2 某些分子片共价的Vi

Vi	M^i	分子片举例	价轨道	(NVO)i	i
1	M^7	CH_3, NH_2, OH, SH, OCH_3	sp_3	4	7
	M^{17}	$Mn(CO)_5$, $Re(PR_3)_5$, $Co(CO)_4$	d^5sp_3	9	17
2	M^6	CH_2, CR_2, NH, NR, SiH_2, PR	sp^3	4	6
	M^{16}	$Fe(CO)_4$, $Ru(PR_3)_4$, $M(CO)_5$, $Ni(PR_3)_3$, $HCo(CO)_3$	d^5sp^3	9	16
3	M^5	CH, CR, SiR, BH_2	sp^3	4	5
	M^{15}	NiCp $Co(CO)_3$, $TaCp_2$	d^5sp^3	9	15
4	M^4	BH, AlR	sp^3	4	4
	M^{14}	$Fe(CO)_3$, CoCp, $Os(PR_3)_3$, MoAcPy	d^5sp_3	9	14
	M^{12}	$MoCl_4^-$, $ReCl_4^-$, $Cr(CH_3)_4^=$	d^5sp_2	8	12
5	M^{13}	$Ir(PR_3)_2$	d^5sp^3	9	13
6	M^{12}	$Pt(PR_3)_2$	d^5sp^3	9	12
7	M^{11}	$Re(PR_3)_2$	d^5sp^3	9	11
8	M^{10}	$Cr(CO)_2$, $W(CO)_2$, VCp	d^5sp^3	9	10
9	M^9	$V(CO)_2$	d^5sp^3	9	9
10	M^8	Cr(CO), W(CO)	d^5sp^3	9	8

（3）广义的“八隅律”

如果分子片的价电子数i恰好等于它的价轨道数（NVO）i的两倍，则由（4）式 $V_i = 0$ 即得到零价的或闭壳层的分子片，它能独立成为稳定分子。这一原理可以称为广义的“八隅律”。当i = 8，（NVO）i = 4（sp^3）时，这就是八隅律。当i = 18，（NVO）i = 9（d^5sp^3），这就是Sidgwick提出的EAN规律或18电子规律。表2.3列出广义八隅律的特例。

（4）分子总价V和分子片间的键数B

分子中各分子片的共价V_i的总和V称为分子总价，即

$$V = \Sigma V_i = 2\Sigma\,(NVO)_i - \Sigma_i = 2(NVO) - NVE \qquad (5)$$

式中NVO为总价轨道数：　$NVO = \Sigma\,(NVO)_i$

表2.3　广义“八隅律”

广义八隅律	M^i	i	(NVO)i	价轨道	举例
2电子规律	M^2	2	1	s	LiH，LiR，Li_2
4电子规律	M^4	4	2	sp	BeR_2，R—Mg—Cl
9电子规律	M^6	6	3	sp^2	BEt_3，$Y(CH_3)_3$，$Ln(Ph)_3$
八隅律	M^8	8	4	sp^3	CH_4，NH_3，H_2O，HF，$AlCl_4^-$
10电子规律	M^{10}	10	5	sp^3d	PCl_5，SP_4，ClF_3，$TeCl_4$，SBF_4^-，BrF_3，ICl_2^-，XeF_2
12电子规律	M^{12}	12	6	sp^3d^2	SF_6，MoF_6，PF_6^-，$SiF_6^{=}$
14电子规律	M^{14}	14	7	sp^3d^3	IF_7
				d^5sp	AgI_2^-，$AgCl_2^-$，$MoAuPPh_3$
16电子规律	M^{16}	16	8	d^5sp^2	Cp_2ZrCl_2，Cp_2Cr
18电子规律	M^{18}	18	9	d^5sp^3	$Ni(CO)_4$，$Fe(CO)_5$，$Cr(CO)_6$，$Fe(Cp)_2$，$Hg(CN)_4^{=}$，$LaCp_3$
20电子规律	M^{20}	20	10		$NiCp_2$，$ZnCl_5^{3-}$，$Ni(H_2O)_6^{++}$
24电子规律	M^{24}	24	12	$f^3d^5sp^3$	$ThCp_4$，$CeCp_4$

NVE为总价电子数：　　$NVE = \Sigma_i$

分子片间的键数B等于总价V除以2，即

$$B = V/2 = NVO - NVE/2 \qquad (6)$$

下面举例说明（6）式的应用。

(5)应用实例

① $H_3Re_3(CO)_{10}^{=}$

在此三铼原子簇中，每一Re原子有7个价电子，每一羰基配体提供2个价电子，每一个H原子提供一个价电子，再加上整个分子所带的二个负电荷，所以

$$NVE = 3\times 7 + 3\times 1 + 10\times 2 + 2 = 46$$

这一分子共有三个分子片，每一分子片的中心原子Re有四个价轨道（d^5sp^3），所以

$$NVO = \Sigma(NVO)_i = 3\times 9 = 27$$

由（6）式，$B=NVO-NVE/2=27-23=4$

即三个分子片之间有四个键。因三原子环只有三个单键，故其中之一必须是双键，示意图如下：



实验测定二个Re－Re键的键长为3.03Å，一个Re＝Re键的键长为2.78Å，与预测的结果一致。表2.4列出其它铼原子簇的NVE、NVO和B值，预测的结构和实验键长。

表2.4　由计算的B值预测某些铼原子簇的结构

分子式	NVE	NVO	B	结构式	Re—Re键长
$HRe_3(CO)_{14}$	50	27	2	Re—Re—Re（两个单键）	3.29Å
$H_2Re_3(CO)_{12}$	48	27	3	三角形，三个单键	3.10Å
$H_3Re_3(CO)_{10}^-$	46	27	4	三角形，两个单键、一个双键	3.03 2.78
$Re_3Cl_{12}^{3-}$	42	27	6	三角形，三个双键	2.47
$Re_4(CO)_{16}^-$	62	36	5	菱形，四边加一条对角线	2.99
$H_4Re_4(CO)_{12}^-$	60	36	6	四面体	3.09

② $Os_5(CO)_{19}$

$NVE=5\times8+19\times2=78$；$NVO=5\times9=45$

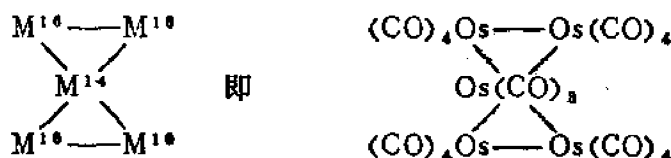
$B=NVO-NVE/2=45-39=6$

这一原子簇的分子片式可以写如



$$Os_5(CO)_{19}=[Os(CO)_4]_4[Os(CO)_3]=(M^{16})_4M^{14}$$

M^{14}是4价的，M^{16}是2价的，分子片之间共有6个键，下面的结构式符合这些要求。

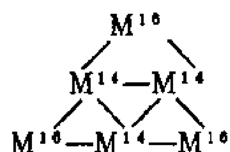


这一结构已被实验所证明。B. F. G. Johnson等最近又合成了一个原子簇，$Os_6(CO)_{21}$，它的分子片式可以写如

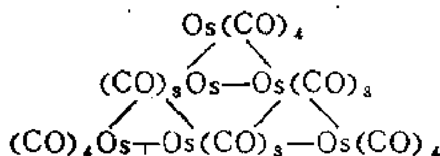
$$Os_6(CO)_{21} = [Os(CO)_4]_3\ [Os(CO)_3]_3 = (M^{16})_3(M^{14})_3$$

$$NVE = 16\times 3 + 14\times 3 = 90,\quad NVO = 6\times 9 = 54$$

$$B = NVO - NVE/2 = 54 - 45 = 9$$



即



图示结构式符合分子片M^{16}为2价、M^{14}为4价和分子片之间共有9个键的要求，并为晶体结构测定所证实。

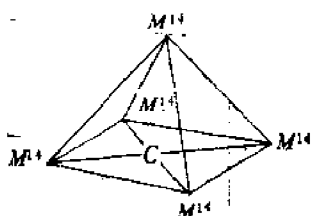
③ $Fe_5(CO)^{15}c$

这一原子簇的分子片式为

$$[Fe(CO)_3]_5C = (M^{14})_5(M^4)$$

$$NVE = 14\times 5 + 4 = 74,\quad NVO = 5\times 9 + 4 = 49$$

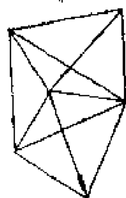
$$B = NVO - NVE/2 = 49 - 37 = 12$$



下列结构式满足分子片的4价和B值的要求。

④ $Os_6(CO)_{18} = [Os(CO)_3]_6 = (M^{14})_6$

$$NVE = 6\times 14 = 84,\quad NVO = 6\times 9 = 54,\quad B = 54 - 42 = 12$$



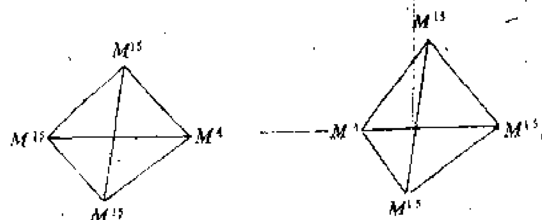
左图结构式满足6个分子片都是4价，而B＝12的要求，并为实验所证实。

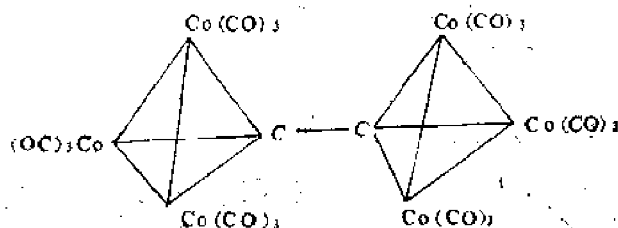
⑤ $Co_6(CO)_{18}C_2 = [Co(CO)_3][C]_2 = (M^{15})_6(M^4)_2$

$$NVE = 6\times 15 + 2\times 4 = 98,\quad NVO = 6\times 9 + 2\times 4 = 62$$

$$B = 62 - 49 = 13$$

下列结构式符合分子片的共价和总键数B＝13的要求并和实验测定结果一致。即





徐　光　宪

3. 化学亲合力概念的演变

化学亲合力是化学发展中出现的一个重要概念。它的演化阶段标志着人类对于物质的组成、结构和反应认识的不断深化过程。考察化学亲合力概念的演变，对于认识化学发展的规律，将具有重要意义。

早 期 的 观 念

早在人类文明曙光初升的时代，人类就接触了自然界中许多化学现象，并随着古代自然观的萌发，提出了对物质变化的解释。最初，这种解释具有拟人观的特征，借喻人的感情爱和憎说明化合和分解。例如，古希腊哲学家恩培多克勒提出，元素在爱的影响下结合，在憎的影响下分离；医学家希波克雷特用亲属关系解释化学作用。公元十三世纪，炼金家阿尔伯特·马格纳提出亲合力概念，其原意也是姻亲关系。

近代自然科学产生以后，对化学运动原因的解释脱去了拟人观的色彩，开始了科学的研究。在近代自然科学中，化学亲合力是和原子论结合在一起的。十七至十八世纪，原子论带有机械论的烙印，原子被认为具有纯粹力学的性质，作为使它们彼此结合起来的原因，化学亲合力自然也具有纯粹力学的性质。这在牛顿和波义耳的观点中得到了具体表现。

牛顿曾将化学微粒之间的吸引与物体间的引力，电力和磁力进行比较，他认为它们之间的区别仅仅在于：化学微粒之间的吸引只有在距离很小时才发生作用，而物体间的引力等可在较大的距离间发生作用。

波义耳是近代化学的奠基人，他把实验方法引进化学，提出了化学元素的科学定义，他认为，化学的主要任务是研究万物由什么组成，万物分解成什么。波义耳提出，物质由无数微粒组成，这些微粒可以互相结合成较大的微粒，“相异二元素之微粒相互吸引，则生成第三种物质，即成为化合物。倘若此化合物中二元素成分之相互亲合力小于其中一成分与第四物质之亲合力，则此化合物即分解，而另生成第五种物质”①。波义耳试图用力学原理说明化学亲合力的性质，又用这种亲合力大小不同解释各种微粒的分解和结合。

波义耳已经提出了通过不同微粒之间反应能力确定亲合力相对大小的思想，但他没有进行具体的比较研究。法国化学家佐福里在这个方向上做了有意义的工作。他指出，物质间的反应能力可以进行比较，比如两个物体（a和b）相化合，如果第三个物体（c）与其中一个物体（如a）有较大的亲合力，它就能从该化合物中置换出物体b。他基于这种想法，通过实验于1718年提出了一个亲合力相对大小的比较表。此后，相继有许多化学家研究亲合力表。例如，施塔尔于1720年，贝格曼于1775年分别提出了亲合力表。贝格曼将亲合力看作是吸引力，是物体化合的原因，也是物体发生化学变化的原因。

法国化学家贝托雷对化学亲合力进行了深入的探讨，于1801年发表了《亲合力定律的研究》，经过修改补充于1803年发表《化学静力学概论》，提出了一些很重要的思想。他指出，化学反应一方面决定于化学亲合力的大小，另一方面也决定于反应物的质

---

① 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，94—95页。

量，同时，外部条件首先是温度对化学反应过程和化学反应的结果有较大影响。

从佐福里建立化学亲合力表到贝托雷发表《化学静力学概论》，将近一个世纪。这段历史表明：自波义耳之后，化学亲合力成了化学研究的主要问题之一；化学亲合力被看作物质粒子的一种特性，它使物质粒子彼此化合；化学亲合力的大小可以通过物质粒子之间的相互作用即化学反应来测量，从这方面看，化学亲合力的相对大小又表征着物质粒子的反应能力。这个时期的化学家基于这些认识推进了对化学反应的研究，而且这种研究步步深入。佐福里的亲合力表只是对少数物质反应能力相对大小的简单归纳，贝格曼则研究了化学反应的一些性质，贝托雷已经触及化学反应方向、反应进行程度，内部和外部因素的影响等问题，在思想实质上已经接近后来确立的质量作用定律。但是，在这个方向上的研究没有取得具体成果，贝托雷的学说没有引起重视，在此后的一个时期即19世纪前半期，化学研究的重点转移到物质的组成和结构上去了。这是什么原因呢？一方面是由于贝托雷的学说本身存在严重缺点，另一方面还有着深刻的认识论根源。众所周知，物质和运动不可分割，具体的物质形式和具体的运动形式有密切联系，尽管这种联系具有复杂的性质。人们认识物质的性质要通过它的运动形式，研究运动形式又要揭示它的物质基础。恩格斯指出，就认识的一般次序来说，“必须先研究事物，而后才能研究过程。必须先知道一个事物是什么，而后才能觉察这个事物所发生的变化。自然科学中的情形正是这样”①。十八世纪由于从量的方面比较化学亲合力，化学开始走上了研究化学反应的道路。而要深人研究化学反应，揭示其规律性，必然要求弄清楚物质的组成和结构，了解在化学反应中什么东西发生了变化，什么东西没有变化。这些正是十九世纪上半叶化学所要回答的问题。

从组成和结构方面提出的概念

十八世纪末，在研究化学反应中积累起来的关于物质组成及其变化的资料的基础上，相继发现了当量定律、定组成定律等经验定律。1803年，道尔顿提出了化学原子论，统一解释已知的化学现象，揭示出化学经验定律之间的内在联系。

道尔顿原子论，虽然暗含着原子间具有相互作用的思想，但并没有说明这种相互作用的原因。与原子论建立的同时，电学获得了长足进步，对电解现象的实验研究取得了引人注目的成果。贝采里乌斯正是基于电解现象，试图从电学的观点说明物质相互化合的原因，建立关于化学亲合力的理论。他于1812年提出了电化二元学说。他认为，化学元素的原子都具有正电和负电不相等的两极，因此，有的原子显正电性，有的原子显负电性，化学相互作用可归结为静电相互作用；原子之间化合以后，电性不能完全抵消，所得化合物可以再次化合，形成第二级化合物。这个学说不但解释了当时已知的无机化合物，还被用来解释有机化合物的形成。但是，由于二元学说不能解释有机化学中发现的一些新事实，所以后来被放弃了。尽管如此，这个学说认为原子具有电性，化学亲合力是这种电性的相互作用，不能不说是合理的因素。可以认为，这个学说是在当时的条件下，对化学亲合力作出的定性解释。

道尔顿原子论提出了测定原子量的任务，引起了化学界的广泛注意。这项工作的展

① 《马克思恩格斯选集》第四卷，人民出版社，1972年，240页。

开又促进了对化合物组成的认识。一些化学家注意到，一切化学元素生成化合物时，与它相化合的原子具有一定的"化合力"，要求结合一定数目的原子为满足。有些化学家，如凯库勒认为，元素原子的这种化合力，表示它具有一定的"亲合力单位"，后来发展为原子价（也叫化合价）的概念。在化学家们看来，原子价是化学元素的原子所固有的一种性质，是原子形成化合物的一种能力，在量的方面可以用与某一原子相化合的其它元素的原子或基的数目来表示。这样，原子价就成了化学亲合力的具体表现，它是化学亲合力的整数量度。与此差不多同时，在化学中还引入了化学键的概念。应当指出，在化学理论发展中，原子价和化学键这两个概念长期混淆不清，许多化学家，如弗兰克兰、凯库勒等人，常常把这两个概念看作是同一的，库帕（A. S. Couper，英，1831—1892）还提出在原子之间划一短线表示价键。其实，原子价和化学键，二者既相联系又有区别，前者表征一原子结合其它原子的数量，后者表征原子之间结合的力量或强度，它们反映着原子结合成化合物的能力。如果说，贝齐利乌斯的电化二元学说对化学亲合力作了定性的探讨，那么，原子价（以及化学键）概念的提出，则从量的方面表示出元素的原子所具有的亲合力值，或者说，为在量的方面对化学亲合力进行量度提供了可能。

到十九世纪中叶，随着化学结构理论的建立，化学亲合力成为原子结合成分子的原因，正如布特列洛夫所指出的，"假定一个化学原子具有一定的和有限的化学亲合力值，化学原子借这种亲合力来参加形成物质。那么，我拟将这种化学关系，或者说在所组成的化合物中各原子间的相互连接，用'化学结构'这个词来表示"①。在这里，化学亲合力是各原子相互连接的原因，而原子的化学亲合力值则是一定的和有限的，可以用原子的原子价表征出来，可以直观地用原子之间的连线来表示。

从上面的分析可以清楚地看出，在关于物质的组成和结构的研究中，提出了新的概念和理论，这些概念和理论又将关于物质的组成和结构的经验事实与化学亲合力概念联系起来，使之得到发展和具体化。诚然，在十九世纪，以物质的组成和结构的研究来认识化学亲合力仍处于现象论阶段，还没有达到揭示其本质的程度。但是，随着物质结构学说的建立和发展，使得化学亲合力的本性问题以比过去更为具体和尖锐的形式呈现在科学家的面前。如果说抽象的化学亲合力可能给人以错觉，似乎问题已经解决，那么作为这个力的直观表现的原子价，原子之间的连线，它们的物理实质是什么，在它们的背后隐藏着什么，就要求进一步作出科学的、明确的回答。就这个意义来说，这个时期结构理论的发展，向揭示化学亲合力的物理本质前进了一大步。

从反应中建立概念

物质的组成和结构与化学反应是不能绝然分开的，是相互联系在一起的。例如，原子价作为原子化学亲合力的整数量度，它可以表示物质分子中已经形成了的原子之间的化学结合，也可以表示原子所具有的能够结合另一些原子的潜在能力。在后一种情况下，原子价是自由原子亲合力的整数量度，它实质上反映着原子的反应能力。在前面我们已经说过，从波义耳开始，包括佐福里、贝格曼和贝托雷等人，他们早在十八世纪就提

① 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，175—176页。

出了从化学反应中去探寻物质的反应能力，进而找出量度化学亲合力方法的思想，时隔半个多世纪，到了十九世纪中叶，一些化学家又开始注意对化学反应的研究，而且这种研究是和化学亲合力概念密切相关的，是和寻求化学亲合力的量度联系着的。

一些化学家试图从参与反应的物质对化学反应过程的影响方面去探索化学亲合力的量度，促进了对化学反应的认识，逐步明确了化学平衡、化学反应速度、反应物质量对反应的影响等概念，在此基础上，古德贝格和瓦格（P. Waage，挪威，1833—1900）建立了质量作用定律。他们从研究化学亲合力问题出发，将反应速度和反应平衡结合起来，从平衡中研究过程，表明了反应速度与反应平衡之间的联系和区别，以及反应速度与反应物质量之间的关系。

还有一些化学家，试图从化学反应与其它运动形式之间的关系去探索量度化学亲合力的方法。例如，瑞士化学家黑斯（G. H. Hess，瑞士，1802—1850）发现，“在任何一个化学过程中，不论该化学过程是立刻完成，或是经过几个阶段完成，它所发生的热总量始终是相同的”①，由此他设想，化学反应热效应可以作为化学亲合力的量度。此外，还有人试图从化学反应与电流的关系中测定化学亲合力，但是这些研究都没有成功。

运动形式之间的关系，它们之间的联系和转化，除了量的方面以外，就对化学反应的研究而言，重要的是解决转化的方向和趋势。这方面的问题是借助于热力学理论解决的，由此形成了化学热力学。

十九世纪中叶，在总结实践经验的基础上，相继建立了热力学第一定律和第二定律。克劳胥斯提出用状态函数熵描述自发过程的不可逆性，用熵变来判断过程的方向和限度。自然界中的物质变化与能量变化是密切联系的，克劳胥斯的思想具有普遍意义。许多学者纷纷用热力学定律研究化学反应。但是，当把熵判据应用于化学过程时，遇到了计算熵变的困难，需要找出适合于化学反应特点的简化模型。在这方面吉布斯作出了重要贡献。他在其他学者研究的基础上，得出一个新的状态函数，即恒温恒压位，又称做吉布斯自由能，它的变化可以表示在恒温恒压下过程的方向和限度。化学反应可以看作恒温恒压条件下进行的过程，因此，用吉布斯自由能的变化，可以判断化学反应能否进行以及方向和限度。吉布斯还提出化学位的概念，将吉布斯自由能和物质的化学成分联系起来。这样，解决了化学反应的量度方法问题。

十九世纪下半叶，化学亲合力概念和化学反应过程联系起来，这时化学家们考虑的亲合力已经不是使原子结合为分子的作用力，而是化学过程中的亲合力。由于化学热力学的发展，吉布斯等人的研究成果，特别是二十世纪初路易斯和兰得尔在他们写的教科书中明确指出，吉布斯自由能和化学位是化学反应的量度，在许多说英语的地区不再使用“亲合力”，而采用自由能的概念了②。

在这里应当指出，在近代科学中，化学亲合力概念是在牛顿力学的思想影响下应用于化学的。恩格斯曾经指出，力这个概念在力学中是运动转移的一种表现形式，只要运动是自己转移的，是主动的，就可以看作运动的原因，它显现为力。但在化学反应中，

---

① 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，194页。

② 参见亨利·M·莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，230—231页。

表现为物质的相互作用，相互作用的各个部分之间没有发生运动的转移，只是在相互作用中和相互作用的结果，发生了化学运动与其它运动形式的转化。因此从化学反应这个角度看问题，把化学运动的原因归结为化学亲合力是片面的。同时，在化学反应中，运动的转移，本质上是排斥运动而不是吸引运动，它表现为能。化学亲合力这个术语很容易被理解为吸引，这在理论上很容易造成混乱①。

深入结构揭示亲合力的本质

十九世纪末，发现电子以后，深入到原子的内部结构，逐步建立起现代化学键理论，人们对化学亲合力本质的认识更深入了。

1916年，柯塞尔依据原子的电子层模型提出，不同元素的两个原子相互作用，可以失去或获得电子，形成带电的正负离子，它们之间的静电作用形成离子键。柯塞尔的理论在新形式中恢复了贝采里乌斯的思想，它可以解释离子型化合物的形成。

同年，路易斯提出，两个原子可以共有一对电子，通过共有电子对使两个原子结合起来，形成共价键。这样，两个键连原子中的一对电子就可以表示一根价键，它以共有电子对的概念简单明了地说明了共价键的物理意义，从而也就说明了亲合力单位的物理意义。路易斯的理论表明，化学家多年试图说明的化学亲合力，其物质基础是原子之间的共用电子对。

但是，路易斯的理论是纯经验性的、定性的理论，它没有说明电子对为什么和如何使原子互相结合起来，是怎样形成化学键的。路易斯的理论，就其基本思想来说是和经典化学结构理论一致的。著名的德国理论化学家休克尔曾经指出，从凯库勒、库帕开始发展起来的化学结构理论，将物质看作分子的总和，分子具有该物质的一切性质，分子由原子组成，而且将分子中被结合原子之间的一切相互作用，归结为两个邻近原子之间的个别相互作用，是两个原子之间亲合力单位的相互饱和。休克尔将这种结构图景叫做加合性图景，是以加合性思维方法建立起来的。他进一步指出，从1916年开始发展起来的路易斯、朗缪尔化合价的电子理论，为更深入地理解化学键的物理本性开辟了道路，但是在这种形式中它还没有超出加合性结构图景的范围。休克尔的这种看法无疑是有道理的。有些学者认为，早期结构理论中的加合性思维完全在于旧的形而上学研究方法和思维方法，路易斯、朗缪尔等人的电子论重新描绘化学亲合力的加合性图景是一种倒退②。这种看法是不够全面的。路易斯等运用刚刚确立的原子电子壳层结构理论解释化学键的实质，说明了化学亲合力的本质，这无论如何是一种进步。从认识论的观点来说，人的认识从对象的简单联系开始，逐步认识对象的多方面的联系，是合乎规律的。在经典化学结构理论发展中表现出了这种规律性，在原则上是新的理论领域——电子论的发展中也表现出了这种情形，路易斯等人的电子论只反映了原子的电子层结构在成键中的简单联系，在以后的发展中逐步揭示出复杂的联系，这个发展过程是在量子力学产生以后逐步实现的。

---

① 参见恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，91页。
② Von Walter Hückel, *Die Chemische Binndung* 1957；参见俄译本，莫斯科，1960年，28—33页。

1927年海特勒和伦敦用薛定谔方程研究氢分子，将量子力学和化学键结合起来。他们用近似方法计算氢分子体系的波函数和能量，得到氢分子的电子云分布等密度曲线和能量曲线。计算结果表明，氢分子有基态和推斥态两个状态。基态的能量曲线有一个最低点，与之对应的电子云分布等密度曲线在核间比较密集，推斥态的情况正好相反。由于两个原子的电子云密集于两个原子核之间，使体系能量降低，形成了稳定的氢分子。他们第一次用量子力学方法揭示出氢分子中共价键的实质。

在海特勒和伦敦处理氢分子的方法基础上形成了价键理论，解释了共价键的饱和性和方向性，但对一些问题还无法作出解释，例如碳原子为什么是四价的。1931年鲍林和斯莱特（J.C.Slater，美，1900—）提出了杂化轨道理论，设想在碳原子与其它原子结合时，处于基态时两个2*s*电子中的一个可以激发到2*p*的一个空轨道上去，混合杂化形成四个新轨道，形成四个等效的共价键。后来，鲍林进一步把*d*轨道也加进去形成*d*-*s*-*p*杂化轨道，用以解释络离子的结构。这些说明，随着化学实践和理论的发展，在相应的理论中日益反映出对象的多方面的相互联系和相互作用。在海特勒和伦敦的理论中，主要研究的是氢原子中的一个电子和它们形成的电子对，如果说它实质上是路易斯电子对在量子力学中的对应物，并将定性解释发展为定量计算的话，那么在杂化轨道概念中已涉及了外层电子壳层不同副层中电子之间的相互作用。

在建立价键理论的同时，由于密里肯、洪特(F.Hunter，德，1896—)、伦纳德-琼斯等人的工作，建立了分子轨道理论。这种理论把分子看作是一个相互作用的整体，它解释了更多的化学事实。应用分子轨道理论对一些复杂分子进行计算，最初是半经验性的，是用休克尔方法进行的。随着电子计算机的发展和在化学计算中的应用，比较精确的、需要进行复杂计算的哈特利-福克方法得到了应用，后来又发展了其它方法。

现代化学键理论从定性解释到定量计算，从计算简单的分子到计算比较复杂的分子，从不精确到比较精确，从经验、半经验性计算到非经验性计算，一言以蔽之，从简单到复杂，这种发展反映了人们对原子内部结构，对化学键本质认识的不断深入。这个发展过程一方面表现为对原子电子壳层丰富的结构特性认识的不断深入，另一方面也表现为对原子内部吸引和排斥相互作用认识的不断深入。现代化学键理论，尤其是分子轨道理论，不仅反映了物质内部的吸引作用，而且愈来愈多地注意排斥作用，分子轨道理论中改进计算方法所要考虑的一个重要因素，就是电子间库仑排斥的相关效应 。

值得注意的是，现代理论化学中，对结构的研究和对化学反应的研究日益走向综合。本世纪三十年代，关于动力学的研究进一步发展，向化学反应内部机理深入，提出了反应速度过渡态理论，或叫活化络合物理论。活化络合物既反映着结构，又反映着过程，是结构特性和过程特性的统一。现代化学动力学的重要任务之一是基于反应物的结构概念来研究活化络合物的形成、变形和分解的规律性，动力学研究包括着结构研究。本世纪四十至五十年代，应用量子力学方法研究有机化合物的反应机理，相继建立了各种不同的反映模型②。六十年代，有人利用分子轨道对称性对协同反应机理和空间构型进行分析和总结，1965年伍德沃德和霍夫曼提出分子轨道对称守恒原理，使化学键理论进

---

① 参见В.И.Кузнецов、А.А.Печенкин, *Вопросы философии*, №.5, 77—78 (1972)。

② R.S.马利肯：“光谱，分子轨道和化学键”，参见《量子化学译文集》，上海科学技术文献出版社，1981年，139—144页。

入研究化学反应的新阶段。

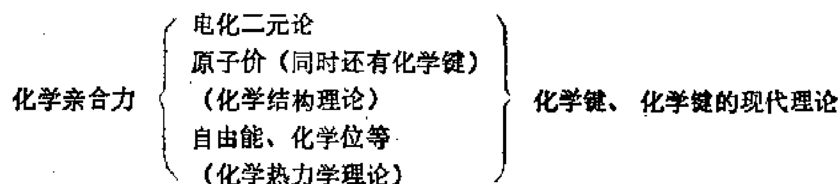
毋庸置疑，无论在揭示化学键本质方面，还是在揭示化学反应机理方面，都存在许多难题。有人指出，关于化学键的本质，“就是把量子化学家集中起来议论好几天也会剩下很多无法了结的问题”①。科学认识是无止境的，已有的问题解决了，还会出现新的问题，而且往往在解决一个问题的同时，又提出了新的问题。

具有重要意义的历史回顾

化学亲合力概念演变的历史，在某种意义上是人类对化学物质及其变化的认识的历史。波义耳以前，人们基于直观和猜测，提出了亲合力概念。波义耳及其以后一段时期，化学亲合力是形成物质和引起物质变化的原因，由于定性的实验分析方法得到了初步发展，从而有可能对化学亲合力进行比较研究。化学分析从定性发展为定量，导致对物质的组成和结构的研究。十九世纪前半期，建立了化学原子论和化学结构学说，提出了原子价、化学键等新的概念，化学亲合力主要表现为保持物质相对稳定状态的原因，突出了物质的互相吸引的特性。到十九世纪下半期，把化学亲合力主要看作引起物质变化的推动力，通过化学反应寻求它的解释和量度。因此，在化学结构理论进一步发展的同时，化学研究又从结构特性转向了反应特性，研究了化学过程和化学过程中的能量转化，产生了吉布斯自由能和化学位等概念。从能量转化的角度来看，正像恩格斯所指出的，突出了排斥的方面②。进入二十世纪，深入到了原子的内部结构，化学亲合力主要表现为化学键，人们对它的本质随着化学键理论的发展而不断深入和发展。现代化学键理论揭示出，化学亲合力不仅仅是原子之间的吸引作用，而是吸引与排斥的相互作用。是吸引和排斥的对立的统一。

化学亲合力概念的历史演变，经历了曲折的过程：最初，化学亲合力是物质及其变化的原因；接着经过分化，化学亲合力主要表现为保持物质相对稳定状态的原因（十九世纪前半期），随后又作为引起物质变化即化学反应的原因进行了研究（十九世纪下半期）；最后又趋向综合，化学亲合力在化学键概念中得到了更明确的体现，而化学键理论的发展，不仅能够说明化学结构中的一些问题，而且能够说明化学反应中的一些问题。

在化学的历史发展中，化学家们不断对化学亲合力进行定性和定量的研究，对它的认识不断深化和具体化；同时，还不断提出新的概念，使化学亲合力在新的概念中得到体现，并随着新的概念的发展而发展。从前面叙述的历史过程中已清楚地看到，结合结构特性对化学亲合力的研究，贝采里乌斯提出了电化二元论的概念，后来又出现了原子价概念，结合反应特性研究化学亲合力，形成了自由能和化学位概念，二十世纪，化学亲合力又主要在化学键的概念和理论中得到了体现和发展。这个发展过程可以简示如下：



---

① 《量子化学译文集》，上海科学技术文献出版社，1981年，133页。
② 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，62—69页。

这个图示表明，化学亲合力概念的演变历史，反映了人类对化学运动认识的历史。这个认识史，是以认识化学运动的原因为中心线索发展的。这就提出了一个问题，在认识化学运动的历史中，原因和结果之间的关系是怎样的呢？

在化学的早期发展中，为了解释化学运动的原因，提出了化学亲合力概念，以抽象的形式确定了因果联系：原因——化学亲合力；结果——化学现象。问题似乎解决了，实际上并没有解决，也不可能解决。后来通过两条线索，对这个因果联系的认识不断深入，不断具体化。一条线索是直接研究原因自身，探讨化学亲合力究竟是一种什么作用，人们依据已有的经验资料和理论观念赋予它不同的性质。如在十七、十八世纪，将化学亲合力看作力的作用，到十九世纪初，又认为它是一种静电作用。这些观念在一定程度上说明了已知的化学现象，随着实践的发展，出现了新的事实，认识也就进一步深化。另一条线索是研究假定的化学亲合力所引起的现象，从结果去逐步认识原因。化学亲合力既表现为形成和保持物质的原因，又表现为引起化学变化的原因。因此，化学家们分别对这两个方面的情况进行了研究。如前所述，这些研究促进了对组成结构和化学反应的认识，推动了化学的发展。

这后一条线索，就其直接的目标来看，表现为探索化学运动的具体作用方式，而不是它的原因。例如，对物质的组成和结构的研究，着重注意的是组成物质的基础，物质以什么方式构成；对化学反应的研究，主要是搞清化学反应能否发生，怎样进行。化学家们的这些研究工作，与其说是解决化学运动“为什么能够发生”的问题，不如说是回答“如何发生”的问题。化学认识史表明，通过认识“如何”逐步接近认识“为什么”。

其实，这种情况不独表现在化学史中，它具有普遍意义。在力学史上，开普勒（J. Kepler，德，1571—1630）行星运动三定律说明的是行星怎样运动，遵循什么规律运动，牛顿万有引力定律主要的是说明行星运动的现状，在一定程度上说明了行星运动为什么遵循这样的规律。康德和拉普拉斯从发展的观点回答了行星为什么能够绕中心天体运动的问题。人们的认识往往从“什么运动”开始，经过“如何运动”初步达到“为什么运动”。就因果关系来说，从结果去认识原因，有时需要中间环节，通过“如何”或“怎样”去接近或达到“为什么”。在科学认识的一定阶段，避开原因，或者说暂时不去研究为什么，而着重于研究什么和怎样，这是推进认识发展的重要方法。伽利略曾经反对亚里士多德和中世纪经院哲学的传统，他不去追溯力的本性、重力的原因这样一些抽象的问题，提倡研究运动怎样发生（如落体怎样降落），应当用什么样的数学关系来表示这样一些具体的问题，在近代力学发展中起了积极作用。

原因和结果是唯物辩证法的一对重要范畴，它反映着客观现象之间的规律性联系。列宁不止一次地指出，辩证法、认识论和逻辑学是一致的。因此，原因和结果是唯物辩证法的范畴，同时也是认识论的范畴。上面对因果联系在认识中的表现所进行的分析，具有重要的认识论和方法论意义。这个分析表明，当我们研究一事物而尚不知其原因的时候，往往是对该事物的认识不够深入的时候，为了探索它的原因，可以提出可能的原因，试探着去解释已知现象；这个原因具有假说的性质，起着假说的作用，成为通向认识真正原因的桥梁。或者从结果入手，暂时撇开原因本身的性质，着眼于作用方式，总结具体的规律性，迂回地去认识原因。当然，也可以将上述两个方面结合起来进行探

索。这种思想方法有利于打开思路，有利于研究工作的展开。

化学亲合力概念的历史演变过程说明，人类对化学运动的原因和本质的探索，许多情况下不是单独在化学领域中进行的，而是和自然科学的其它领域，特别是和物理学有着密切的联系。

从科学的历史发展来看，自然科学最初包括在哲学中，也没有独立的物理学和化学。随着近代自然科学的产生和发展，化学与物理学逐步分家。十七世纪，波义耳把化学确立为科学，十八世纪，拉瓦锡建立了氧化燃烧理论，实现了化学中的第一次革命，十九世纪形成了化学的理论体系。到十九世纪中叶，各门科学出现了相互渗透和综合的趋势。在物理学和化学之间产生了边缘学科物理化学，其中就包括化学热力学。二十世纪，物理学的研究范围更加扩大了，所研究的物质层次也更加深入了。物理学提出的一些基本理论，如量子力学，成为化学的理论基础，应用量子力学研究化学键问题，形成了现代理论化学的主要内容之一——量子化学。

苏联学者别切金从方法论观点分析了科学发展的这种规律性，提出了科学知识的深度发展和广度发展范畴。所谓深度发展，是认识向深处发展，提出新的思想，形成新的概念和理论；广度发展则是认识向广的方面扩展，将新理论应用于新的领域①。依据这种观点，量子化学是科学知识广度发展的产物。可以认为，深度发展和广度发展是认识从特殊到一般，又从一般到特殊的一种表现形式。应当强调指出，知识的广度发展，正象认识从一般到特殊一样，不只是量的扩张，而且包括质的发展。一种理论应用于新的领域，与新的对象结合，需要创造性的研究工作，结合的产物在原则上是一种新的东西，新的理论，新的学科。

从上述分析中可以引伸出重要的认识，在方法论上给我们一种启发，这就是要善于将科学中新的理论变为研究问题的方法。谁都知道，人们认识事物，研究问题，需要一定的理论原则作为指导。当然，"原则不是研究的出发点，而是它的终了的结果"②。但是，理论原则一旦从研究中得出，反过来就成为进一步研究的向导，成为认识新事物的方法。理论和方法既有联系又有区别。科学理论首先是已经获得的知识的表现和系统化，同时又是进一步认识的指南。在后一种情况下，理论就成为方法。方法的基本内容是科学理论，但科学理论本身还不是方法，只有将科学理论作为认识和行动的准则的时候，它才成为方法。将理论转化为方法依赖研究者的自觉能动性。在认识化学运动历史中，一些学者如海特勒和伦敦，深刻理解了量子力学，并实现了这个转化，开创了量子化学的研究领域。这些说明，科学工作者应当及时了解科学的最新发展，善于应用新的科学理论观察和思考问题，这是推动科学进步的重要因素。从这个观点来看，一个科学工作者应当注意不使自己的眼光局限于专业的狭小范围，保持全面观察问题的能力，这是非常重要的。

上面，我们以马克思主义哲学观点为指导，分析了化学亲合力概念的演变历史，从而也就从这个侧面探讨了化学思想发展的内在逻辑。这个分析说明，每个时期的化学思

---

① А.А.Печенкин, *Методологические проблемы развития квантовой химии*, "Наука", стр.104 (1976).

② 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，32页。

想，就其内容来说，首先是对那个时期化学实践中所获得的经验事实进行研究的结果和反映，就其理论形式来说，又是对已有的化学理论观念，或者说是对已有的科学理论观念的继承和进一步发展。在化学史上作出贡献的化学家们，既受当时科学思想的影响，又影响当时的科学思想。他们中间的每一个人在某个时期提过什么观点，有很大的偶然性，孤立地看很难加以把握，然而化学思想的发展却有它的规律性。研究化学思想的发展，要基于每个时期化学所面临的任务，化学实践的发展，注意化学与其它学科的联系，把化学家们的研究工作和理论思想，放到化学思想的历史发展中加以分析，考虑这些研究工作和理论思想，如何以及在怎样的程度上反映了化学研究的对象的性质和联系，揭示出规律性。这就是我们从分析化学思想发展中所得到的认识。

张嘉同

4.化学轨道概念的沿革

1981年，瑞典科学院鉴于日本化学家福井谦一创立的“前线轨道理论”和美国化学家霍夫曼提出的“分子轨道对称守恒原理”所取得的杰出成就，决定授予他们二人1981年度的诺贝尔化学奖金，并指出：福井谦一和霍夫曼的理论，是我们认识化学过程发展道路上的里程碑。

那么，分子轨道理论是怎样发展起来并且取得了这样重要的成果呢？这是和轨道概念的历史发展有着密切联系的。所以，有必要考察一下化学中轨道概念的沿革。这样也有助于人们掌握化学基本概念的历史发展。

从宏观轨道类推到微观轨道

轨道一词至少可以追溯到科学的启蒙时代。古希腊的亚里士多德就曾提出过：宇宙天体都是沿着以地球为中心的轨道作圆周运动。伊壁鸠鲁也曾提到：原子本身的运动，不仅作直线运动，而且还会自动沿偏离直线的斜线轨道运动。轨道一词原意是指物体运动所应遵循的固定路线。在西方科学技术著作中，很早就使用了轨道这个概念。例如，1543年，哥白尼在《天体运行》一书中就曾提出，地球是沿着“完美的”圆形轨道绕日运行。后来，开普勒又把哥白尼的圆形轨道修定成为椭圆形轨道，并总结出行星运行的三定律，成功地解释了一系列的天文现象。

哥白尼-开普勒的太阳系行星轨道模型，在以后的自然科学中，产生了深远的影响。1911年，卢瑟福为了解释α粒子的散射现象，他想构造一个微观原子结构的模型。他受到“大宇宙和小宇宙相似”这样一种哲学思想的启发，运用相似和类推的方法，把太阳系的宏观轨道模型推广到了微观原子，设想原子是由一个占有整个原子绝大部分质量的核和一些电子所组成，原子核如太阳，电子如行星，电子绕核运动如同行星绕日运动，从而建立了原子结构的行星轨道模型。从此，轨道概念也就从宏观世界通过相似和类推进入了微观领域。

从原子轨道类推到分子轨道

卢瑟福的原子轨道（即原子中电子运行的轨道）概念提出以后，也解释了一些现

象，但是还有很大缺点。1913年，玻尔又依照旧量子论的观点对卢瑟福的模型进行了修改和补充。然而，由于他把微观的轨道仍然理解为宏观的确定路线，所以仍存在着许多问题。到本世纪二十年代以后，由于德布罗意、薛定谔、海森堡、狄拉克等人的共同努力，逐渐建立了原子结构的量子力学模型。在这个模型中，原子的轨道概念，已经大不同于宏观的轨道概念，微观原子中的轨道，再也不是宏观中所指的那种确定的路线，而是指电子在原子核周围的几率分布，是电子在原子核周围的状态函数。在原子结构的量子力学模型中，尽管还使用轨道这个词，但含意已经有了根本的变化。

量子力学原子结构模型所确定的新的原子轨道概念，比较客观地反映了微观运动的规律，因而能比较圆满地解释微观现象，取得了巨大成功。

人们认识了原子轨道之后，就自然想到：既然原子有轨道，那么分子也可能有轨道。

这个推想后来得到了证实，1927年海特勒和伦敦，成功地用量子力学方法处理了氢分子，确定了电子在氢分子中运动的轨道。这是一种最简单的分子轨道。这样，人们又用相似和类推的办法，从认识原子轨道，进而认识了分子轨道，实现了认识层次的飞跃。

从原子的外层轨道类推到分子的前线轨道

人们在很早以前就注意到化学上这样一个事实：在原子和原子相作用时，主要是原子的外层轨道起作用，而内层轨道一般保持不变。据此，日本化学家福井谦一用相似和类推的办法想到：在分子进行变化时，会不会也类似于原子进行变化时那样呢？会不会也是分子外层轨道起变化，内层轨道也保持不变呢？他从实践和理论上经过长期的苦心钻研，最终发现确实如此！

福井谦一把分子中已被电子占据的最高轨道，和未被电子占据的最低空轨道统称为前线轨道，也就是分子的外层轨道。他证实，在分子发生化学变化时，并不是所有的分子轨道都发生变动，而仅仅是前线轨道发生变动，其它轨道一般保持不变。福井把他用相似和类推获得的这一理论称之为前线轨道理论，这一理论圆满地解释了以前的化学理论所无法解释的许多化学反应历程。它的诞生，标志着人类从认识到原子的外层轨道，进而认识到分子的外层轨道即前线轨道的一个新的阶段。

从原子轨道的对称性类推到分子轨道的对称性

福井的前线轨道理论，不仅能圆满地说明电环合反应，环加成反应，б键迁移反应等一系列的协同反应，同时还能预测反应的方向和产物。几乎是在福井建立前线轨道理论的同时，美国化学家霍夫曼和他的老师伍德沃德一起，也从不同角度对上述反应过程进行了认真的研究。

霍夫曼作为一个化学家，对原子轨道非常熟悉。他十分深刻地认识到，原子的各种轨道，都有着十分和谐的对称性。于是，他就用相似和类推的办法，全面考查了分子轨道的对称性。霍夫曼研究了大量的实验材料，对分子一步完成的协同反应进行了认真的分析。他发现，分子轨道也和原子轨道一样，都具有不同类型的对称性。在分析合成维生素B_{12}和其它某些复杂有机化合物中所遇到的一些问题时还发现，分子在进行协同反

应时，反应物分子轨道的对称性和生成物分子轨道的对称性，竟然十分惊人的一致。这也就是说，在协同反应中，反应物和产物的分子轨道对称性是守恒的。霍夫曼把这个规律称为分子轨道对称守恒原理，也叫伍德沃德-霍夫曼法则。这个原理在大量实验事实的基础上，抓住了分子轨道对称性这一关键因素，能够有效地判断化学反应可能进行的方向和产物，并以其独特的方法开创了一条研究化学反应的新路，无论在实践上还是在理论上都具有重要意义。化学界一致认为，这是理论有机化学和量子化学理论的一颗明珠，而这颗明珠的获得，相似和类推的科学方法起到了重要作用。

总之，在分子轨道理论的建立和发展的过程中，采用了一系列的相似和类推的科学方法，并取得了辉煌的成果。这种方法是考察未知对象和已知对象的某种相似性，进而类推出未知对象和已知对象在更多方面和更深层次的相似性，从而认识未知对象的逻辑方法。当然，对于相似和类推的结果，还要经过实践的检验以证明其正确与否。

化学中轨道概念的演变，经历了一个螺旋上升的过程。这一概念，从宏观的物体先深入到微观的原子，然后又从原子反过来扩展到分子。同时，这一概念也从动力学的规律演化到统计学的规律，从机械运动的固定路线，发展到统计性的波函数的概念，体现了从抽象上升到具体的发展进程。

王 德 胜

5. 一元说对二元说的取代

十九世纪初期的有机化学，正如著名的德国化学家维勒所说，“好像是一座充满着最新奇的东西的热带的原始森林”，还未真正进行过科学理论的开发。1817年，著名瑞典化学家贝采里乌斯，企图把他在无机化学中提出的电化二元学说推广应用到有机化学领域，做为一种“万能”的理论来探明有机化学的迷宫。他认为，有机物也应同无机物一样，“必须是二元的”，“必须由正电组分和负电组分”两个部分所构成①。由于二元学说几乎解释了当时已知的全部无机物，并为无机化学带来了一定的秩序，所以几乎所有的化学家都接受了二元学说及其派生的基团学说，以为它们能够提供揭示有机化学各种奥秘的最后答案。然而人们陆续发现的一些事实，却是同二元学说相背离的。

新发现带来的新学说

1834年，著名法国化学家杜马在参加法国杜伊勒里（Tuilleries）王宫举行的一次社交晚会上，发现蜡烛燃烧时放出了一种使宾客们难以忍受的刺激性气体。他对此进行了研究，发现是由于经过氯气漂白后的蜡烛中的氢已被氯所置换造成的。由此他得出结论：“氯等卤素能够置换出有机化合物中的氢”，并命名为置换定律或取代作用②。早在1815年和1821年，法国化学家盖吕萨克和英国化学家法拉第也都分别发现过这种现象，不过当时并未引起人们的注意。现在的杜马也尚未认识到它的全部意义。他在随后发表的有关论文中就未再应用“取代”一词。

① 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，168页。

② 〔日〕田中 实，《日本科学史大系（近代化学史）》，中教出版社，1954，69页。

但是，杜马的学生、年仅29岁的法国化学家罗朗（Laurent，1807—1853）却以其深刻的洞察力敏感地觉察到了它的重要后果。1836年，他又进一步研究了卤素等对有机物的取代作用，发现取代后的生成物的性质并未发生很大变化。他认为这是由于卤素取代氢以后，“这些元素居于氢的地位，并在某种程度上起着氢的作用，因而新的物质应当与最初的物质有类似之处”。于是他就在取代作用的基础上引伸了一步，提出了一个触及到有机物结构与性质关系的学说：“用其它元素取代有机物的氢以后，可以得到同初始物性质相似的新物质”①。这就是说，他把有机物视为是具有结构类型的一个整体，因而当它的某些部分被其它元素所取代时，其性质大致不变或化学类型不变。这就是罗朗的一元学说。

新学说虽然还未能认识到有机物分子内原子之间的关系，未能揭示出有机物结构的内在本质，然而却开始看到了有机物的某些共性和不同于无机物的特性，并初步了解到，有机物的性质不仅取决于其中的原子的性质，而且也取决于原子的所在位置，即有机物的类型或结构，从而朝着探索有机结构理论的方向上迈出了可喜的一步。

但是，罗朗的一元学说却是同流行于当时的贝采里乌斯二元学说背道而驰的。依照二元学说的观点，有机化合物应当是严格地由带正电和带负电等两个部分构成的“化学建筑物”，这两个部分之间彼此不能相互代替。因此，带负电的氯怎么会能取代带正电的氢？氯又怎能起到同氢的某种相同作用？完全是不可思议的。另外，退一步说，假如真的是氯取代了氢，则取代后的生成物就会含有带着相同电性的两个部分，它们之间就势必要产生巨大的斥力而使原来的原子组合发生彻底毁坏，从而产生出性质迥然不同的新物质，因此，怎么能生成同原来物质性质相近的化合物？简直是不可理解的。当时的多数化学家都是在追随贝采里乌斯而具有这种看法。这样，当新兴的罗朗学说一经提出，就遭到了来自各个方面的反对以至攻击，使它具有了一段坎坷不平的遭遇。

事 实 战 胜 了 假 想

新学说首先受到了声望很高的贝采利乌斯的猛烈抨击。他声称，这种学说“是与化学基本原理相矛盾的”，它“给人以假象”，“使化学家看不到事物的真实面目”，从而“不利于科学的发展”②。但是，他却错把罗朗的观点当成是罗朗的老师杜马的观点了，因而直接点名攻击了杜马。这使杜马大为震惊。他立即出来辩解说，那是罗朗的观点而不是他的观点，因而不要“强加于”他，他也是“极力反对的”。他强调他所提出的取代作用仅仅是一个“经验定律”而与罗朗的说法完全无关。因此他声明，“罗朗对我的学说所作的种种夸大其词的渲染，对此我是概不负责的”③。这样，包括罗朗自己的老师在内，反对者就都把矛头对准了罗朗。贝采里乌斯指名攻击罗朗的观点是“如此离奇”，以至罗朗也“被自己的理论迷住了眼”④，分不清是非了，等等。

罗朗面对二元学说拥护者们的强大攻势，并没有动摇。他坚定地表示他只能服从真理而不屈从权威。他认为贝采里乌斯的论点并没有事实根据。他说，哪怕这位著名化学

① Annales de Chimie, 61, 303 (1836).
② Annales de Chimie, 67, 303 (1838).
③ 日本化学会：《化学の原典》，东京大学出版社，1976年，10，17页。
④ 肖莱马：《有机化学的产生和发展》，科学出版社，1978年，26页。

家能够拿出一个事实来，“我也就会立刻放弃自己的‘奇怪观念’”①，否则将坚持到底。

罗朗继续不懈地积累了实验资料，不断充实了自己的论点，使一元学说得到了越来越多的实验的证实。化学家马拉古蒂（Malaguti）和勒瑙（Regnault）以及罗朗本人又发现了许多有机取代物。特别是在1839年杜马又发现了一个典型事例，即醋酸和取代后生成的氯代醋酸的性质二者“十分相象”，仅有“很小一点变化”②，这使杜马的态度发生了根本转变，从反对转而接受了罗朗的观点，并也开始猛烈批判二元论了。他告诫人们不能再接受贝采里乌斯“这位著名化学家竭力使之成为指导性的那些观念”了，不能再把它“捧为化学家们信仰的象征”而必须予以抛弃。正如有的化学史家所说，他是向贝采里乌斯发动了带“有点醋酸味道”的攻击③。

在化学界颇有声誉的杜马的转变，再加上不断发现的新事实，就使很多化学家开始转而支持了一元学说。但是，贝采里乌斯却仍在为自己的观点竭力辩护，仍攻击一元学说是一种会导致整个化学大厦垮台的“非常危险”的荒谬理论。不过这种徒劳的辩解在大量的事实面前已经是无能为力了。过去曾经同贝采里乌斯站在一起的德国著名化学家李比希也不再同意他的观点，认为它“是建立在一大堆没有任何证明的空想假设的基础上”④。不仅如此，李比希还同杜马联合起来，以两位“化学界的思想领袖”的共同声望向二元学说发动了抨击。这样，再加上罗朗等人的工作，就终于在有机化学领域中战胜了二元学说，宣告了一元学说的胜利。

胜利者的遭遇

应当看到，杜马尽管在初期反对过罗朗的观点，但是转变较快，而且也做出了重要贡献。但是令人遗憾的是，他却未能公平地对待自己的学生罗朗。1839年，他在接受了罗朗的观点之后，却把一元论改称为“类型理论”，强调在“有机化合物中存在着某些类型，即使它们所含的氢被等量的氯、溴和碘所置换，这些类型仍保持不变。”诚然，这比罗朗的一元学说是更为明确和具体了，然而二者的观点则是一致的。但是杜马却把它完全攫为己有，声称只是他自己的理论，而把罗朗抛之一旁。这显然是不公正的。正像罗朗所说，如果这个理论被证明是错误的话，我就成了它的创立者；如果这个理论被证明是正确的话，他就成了它的创立者。这样，罗朗无论怎样都不会正确，而杜马无论怎样都不会错误了。于是罗朗就直言不讳地进行了申诉，然而未获成功，反倒加深了杜马对他的敌意，并招致了严重不利的后果。杜马在法国科学院具有很高声望，左右着对于科学家的任用和升迁。这样，罗朗竟被排挤到边远地区的学校，从事了多年的教书生涯。后来虽曾回到巴黎，然而也未能谋得一个满意的工作，只是当了一名造币厂的化验技术员，以至不得不在一个潮湿阴暗的地下实验室从事研究，一生穷困潦倒，终因染上肺结核症而不幸地过早夭亡，享年仅47岁。

在这种情况下，许多不明真相的化学家就都把杜马视为敢于给二元论以“第一次打

---

① Annales de Chimie, 72, 409 (1839)。

② Ю.И.索洛维耶夫等，《贝采里乌斯传》，商务印书馆，1964年，122页。

③ 同上。

④ J.R.柏廷顿，《化学简史》，商务印书馆，1979年，252页。

击”的人，“并在一场起初看来胜利的结局十分渺茫的艰苦斗争中成为胜者。”① 直到目前，我国的一些化学史书也还有着类似的看法。罗朗的作用往往被忽视了。

历 史 的 公 正 结 论

随着时间的流逝，一些化学家在这场斗争经历中的是非与功过，成功与失败，终究还是由历史做出了公正结论。

（1）罗朗——真正的胜利者。尽管罗朗的研究成果一时为杜马所攫取，罗朗本人也遭到了学术界的冷落，然而他的不幸却逐渐赢得了正直化学家的广泛同情。1851年，著名德国化学家霍夫曼等人访问巴黎时，看到法国化学界对罗朗的故意歧视后很为不满。他为之抱不平地说，他们如此“欺负”这位“当时最出色”的一位化学家，“的确十分痛心”②。另一位著名德国化学家凯库勒在回顾这段历史时不无沉痛地说，这位“伟大化学家所受到的冷遇，至今思之，犹令人痛心不已”③。而对于一元学说提出的优先权，虽然杜马曾一时占了上风，但是，历史还是做出了最后公断。日本化学史家柏木肇指出，“杜马原来并不是一元论者”，而是一位在“当时化学家中最强有力的二元论的推进者”④。美国化学史家莱斯特说，杜马并不是提出而只是“终于承认了一元论”，并把它“改称为类型论”⑤了。显然，优先权应当是属于罗朗的。至于杜马对一元论的态度，著名英国化学史家柏廷顿已经明确评论说：他先是表示“不能对此负责”，而在后来由于“证实这个假说还是相当可靠”时，却“似乎又声称这是他自己的理论”⑥了。寥寥数语，已经把杜马的行为揭露无遗。因而事实上还是罗朗最终成了真正的胜利者。正如革命化学家肖莱马所说，尽管罗朗的“事业和功绩，当其在世时很少有人承认”，然而在他去世后终于“被普遍接受”。他不愧是一位“在创立现代化学体系方面占据着首要的地位”⑦的化学家。

（2）假想——代替不了事实。在一元学说同二元学说的论战中，尽管罗朗是个默默无闻的年青学者，而贝采里乌斯是一位大名鼎鼎的化学家，但是却是以罗朗的胜利和贝采里乌斯的失败而告终了。究其根本的原因不外乎是，罗朗是以实践为标准和以事实为根据的，而贝采里乌斯是以理论为标准，以假想为武器来进行论战的。正如著名法国化学家日拉尔（Gerhardt）所说，贝采里乌斯是发明了“千军万马的假设物体”，引入了无数虚拟的物质来为自己辩护的。他死心塌地地相信一个信条是，“他的敌手的观点只要不符合电化学理论就不可能是正确的”。他的思想方法完全颠倒了。这样就注定了他的必然失败的命运。对此，李比希不无惋惜地说，他不是用事实，而“只是用一支笔”，因而是“在为了一场失败的事业而战斗”⑧。由此就使贝采里乌斯在这里从一位曾经在科学事业中做出过重大贡献的创新者转化成为一个保守者了。这并不是由他的主

---

① Ю.И.索洛维耶夫等：《贝采里乌斯传》，商务印书馆，1979年，121页。
② J.R.柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，258页。
③ 肖莱马：《有机化学的产生和发展》，科学出版社，1978年，26页。
④ 日本化学会：《化学の原典》，东京大学出版社，1976年，10，173页。
⑤ 亨利.M.莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，198页。
⑥ 同①，260页。
⑦ 同③，40—41页。
⑧ 同①，126页。

观愿望所能决定的。他原来也非常不愿意成为一个保守者。他在1829年还告诫过人们绝不能只“拘泥于一种见解”，以免过分“完全相信它的正确”而“掩盖了它的缺陷”，以致“使我们不能接受与其相反的证据”①，等等。现在，由于他脱离了实践，他的这些警告就不以他的主观意志为转移地恰好落到他自己的头上了，以致成了人们的笑柄。可见，在科学事业中假想是代替不了事实的，而实践则是科学研究的生命的基础。

（3）谦逊——科学家的重要品德。罗朗所遭到的不幸，其根本原因固然是来自化学权威们的压制，然而却也有他自身的原因。他在论战时经常缺乏一种谦逊态度，言词尖刻，不够冷静，带有刺激腔调，甚至谩骂对方是进行“罪恶昭彰的欺诈”等等，很易于引起对方和读者的不必要的反感而陷于自我孤立。他虽然是一元论的首先提出者，然而却把它看成是与杜马无关，完全否定了杜马取代作用所提供的基础和类型论的明确化作用，不承认他人之长。这就更激怒了杜马，以致使罗朗陷入了更大困境，从而不利于他本人以至整个科学事业的发展。一位素养全面的科学家，在科学权威的面前既不应怯懦也不应目空一切，而是应当具有一种诚实谦逊的态度，坚持学习与独创，团结与合作，创造一个和谐的顺利环境，共同求得进步。

廖　正　衡

（四）化学发展的动力因素

1. 化学发展的内因和外因

研究化学发展的目的，主要是在于把握化学发展的规律，预测化学发展的未来，推动化学的发展。这就需要研究化学发展的内因和外因，以正确认识和运用化学发展的动力，有效促进化学的发展。

化学已是一门独立的科学体系，而且它是一个包括许多子系统而又为更高一级的自然科学体系所囊括的科学知识体系，要研究化学发展的内外因，就必然会涉及到许多层次、因素和矛盾。它们之间的关系也是错综复杂的。这里只能先对这些因素的地位和作用做一初步讨论。

化　学　发　展　的　内　因

（1）化学实验与理论的矛盾

从历史上看，自从十七世纪中叶化学被确立为独立的学科以来，化学实验的开展日趋活跃，特别是对燃烧现象（包括有机物和无机物的燃烧）开展了广泛的研究，并在此基础上逐步提出了燃素学说。这一学说提出后第一次用统一的观点解释了化学反应，促进了化学实践的发展，直到后来发现了具有革命意义的氧元素。然而随着时间的推移，这一学说却越来越暴露了它同实验事实间的矛盾。比如人们发现金属燃烧后灰渣的重量并非如它所说是变轻了，而是变重了，等等。正是这一实验和理论的矛盾，就最终导致拉瓦锡科学氧化说的诞生，并实现了化学理论上的一场深刻革命。

---

① 肖莱马：《有机化学的产生和发展》，科学出版社，1978年，26页。

燃烧氧化说的成功使化学家受到了鼓舞，人们又进一步注意到了化合物的结构和亲合力的问题。李希特和普鲁斯特在定量实验和数学计算的基础上，提出了当量定律和定组成定律等，这些新发现的许多经验事实，迫切需要上升到更高的理论高度给予解释，从而产生了道尔顿的科学原子论，为化学开辟了一个新时代。从此，化学实验与理论的矛盾运动更加迅速，矛盾双方的相互转化更加频繁，更有力地推动着化学向理论科学过渡。化学实验的专门化为无机化学、有机化学、分析化学和物理化学的分科发展奠定了实践基础，并沿着物质结构的层次步步深入。X射线、放射性和电子的发现，既是现代物理学的实践基础，又是现代化学发展的实践基础。

现代化学实验，对化学理论的发展起着双重作用，它是化学知识的重要来源和检验化学理论的标准。一句话，化学实验是化学理论赖以建立的基础。如量子化学、结构化学、核化学、基本粒子化学等现代化学领域的许多理论，都是在实验的基础上直接产生，又在新的实验中直接得到检验，所以，现代化学实验同化学理论间的矛盾，是一种起着巨大作用的推动化学理论发展的内在动力。

（2）化学实验与化学生产的相互作用

在现代化学科学体系中，化学实验相对于生产已具有独立性，这充分说明了化学实验的重要作用，但不能由此得出化学实验可以包罗一切化学实践的结论，更不能得出化学生产已不是化学发展的基本动力的结论。虽然在十八和十九世纪化学经历了一个独立于生产的发展趋势，然而在现代自然科学体系中，也存在着一种化学的独立性相对减弱的趋势。这是因为，一方面是由于化学与其它学科的相互渗透加强，另一方面是随着“科学—技术—生产”一体化趋势的加强，化学理论向生产转化的时间缩短，速度加快。同时，化学生产对理论发展的影响也在加强，从而使理论指导生产和生产推动理论的相互关系更为密切。

此外，化学生产与化学实验的相互转化，也同时促进着化学生产和化学实验的发展。生产科学化说明了科学对发展生产的作用和生产发展的趋势；而科学生产又说明了现代化学实验的作用和实验发展的趋势。这两种趋势发展的结果，使使生产与实验的关系，越来越密切，它们之间的差距正在缩短。

（3）化学中的分化与综合的矛盾

化学科学内部存在着分化与综合的矛盾运动，有力地推动着化学发展。化学从它作为科学产生的那天起，就标志着它从整体的自然科学中分化出来；而化学作为整体也在慢慢分化着。这种分化作用，似乎在十九世纪达到了高潮，比如出现了无机化学、有机化学、分析化学和物理化学等二级学科。然而与此同时，化学也在高度地进行着综合，比如燃烧的氧化说、原子论和门捷列夫周期律等重大理论的提出和形成，都体现了化学的综合发展的趋向。而物理化学的形成本身，既是一种分化又是一种综合。当化学的发展进入二十世纪之后，化学内部在其分科不断增加的同时，综合的趋势更在加强，化学热力学、化学动力学、化学量子力学和化学统计力学，即所谓的化学的四大力学理论，成了化学理论的高度概括和综合。化学理论综合成就的大小，成了衡量化学理论水平高低的一个标准。化学自身的分化越加速，就越需要不断地进行综合。分化与综合的这种辩证运动，是化学自身发展的基本规律。

（4）不同学术观点的争论

通过不同学术观点、学说或学派的争论，能够进一步揭示化学运动的本质，促进化学研究的不断深入。比如拉瓦锡在十八世纪七十年代刚提出氧化说时，受到了燃素论者的强烈批评和抵制，引起了一场长期的争论。然而这却反倒有力地促进了拉瓦锡的研究工作，推动他终于在1789年出版了他的名著《化学纲要》。在书中他以有力的实验依据论证了氧化学说，从而使他的新思想获得更快和更广泛的承认与传播。此后，当化学家的注意力转向化合物的结构和亲合力的性质时，普鲁斯特和贝托雷之间也展开了一场著名的争论。普鲁斯特通过分析各种纯化的化合物的过程中发现，它们的组成都是固定不变的，从而提出了定比定律；贝托雷则是以分析亲合力入手而研究化合物组成问题的，他认为物质之间的作用除了亲和力外，也与这些物质的数量有关，因为后者能左右反应物的反应方向，并以此为根据，推而广之，得出化合物的成分会发生变化的结论。这种不同观点的争论，促使他们各自进行了大量的实验研究工作。虽然普鲁斯特的假设与当时的实验符合，但贝托雷关于组成可变的思想，对化学以后的发展也有指导意义。又如在二十世纪四十年代至五十年代，关于鲍林共振论的争论，使人们既肯定了它的正确思想，也认识到了它的不足，从而推动了现代化学理论的深入发展。目前，关于化学概念定义的争论，化学与物理学关系的争论，也必然会对化学的发展做出新的推动。

化 学 发 展 的 外 因

所谓外因，是指化学科学体系以外的各种因素对化学发展的作用。这里主要讨论社会因素、哲学和其它自然学科对化学发展的作用。

（1）社会因素的作用

恩格斯指出："社会一旦有技术上的需要，则这种需要就会比十所大学更能把科学推向前进。"① 由于社会因素很多，如经济、政治、道德、法律、生活、教育等等，这里不拟做详细讨论，只想从总体上做一说明。

化学科学技术是社会发展的不可缺少的生产力，尤其在实现社会主义现代化建设的过程中，化学化涉及到国民经济建设的各个领域。马克思指出："经济上的需要曾经是，而且愈来愈是对自然界的认识进展的主要动力。"② 社会的需要对化学发展的作用，主要是通过发展化工生产和化学科学技术而实现的。同样道理，化工生产的发展，要求经济效益、技术效益与社会效益相一致。经济需要会大大促进化学科学的发展。

在社会主义国家，政治需要和经济需要是一致的。社会主义制度的优越性，使广大化学工作者成为国家的主人，知识分子的科学劳动，既受到道德上的尊重，又有法律的保护，科研成果得到实际应用，社会主义积极性得到充分发挥。

通过化学化工教育，培养的化学人才，可以使化学科研队伍和生产队伍具有合理的人才结构和知识结构，从而推动着化学更协调的向前发展。

（2）哲学的作用

在整个科学体系中，化学与哲学是特殊和一般的关系。马克思主义哲学的概念、范畴和规律，对自然科学包括化学的研究工作都有指导意义。恩格斯指出："不管自然科学家

---

① 《马克思恩格斯选集》第4卷，人民出版社，1976年，505页。
② 《马克思恩格斯全集》第37卷，489页。

采取什么样的态度，他们还是得受哲学的支配”①。一位化学家，应该自觉地以辩证唯物主义哲学作指导。现代化学的发展，既高度分化又高度综合，正在向理论科学过渡。为了促进这种发展，更需要辩证的思维方法。

把马克思主义哲学知识引入化学，同化学理论和研究方法融合在一起，就会转化成化学科学的内在因素，并强有力地推动化学发展。在这方面，著名的德国有机化学家卡尔·肖来马，可以作为我们化学工作者的楷模。

（3）其它自然学科的作用

化学综合性的发展趋势，除了化学内部各学科之间相互渗透外，还明显地表现在数学、物理学、生物学等学科向化学的渗透中。这种渗透的结果，是提高了化学的理论性和应用性。

从化学理论发展的现状和趋势看，数学的作用将会越来越大。如前面提到过的化学四大力学已成为化学的基础理论，其中任何一种理论都离不开数学方法。计算化学的产生和发展，更扩大了数学的应用。数学与化学的结合已形成了一个新的应用数学领域——化工数学。如高等代数、数学分析、计算数学、数理逻辑、概率论、运筹学等数学领域均有广泛应用，提高了化学理论的定量化。

物理学向化学的渗透，在十九世纪下半叶就取得了第一个巨大的成果，即诞生了物理化学。这种渗透作用，不只是适应了化学理论发展的需要，而且对化学的发展还会引起革命性的飞跃。物理化学的产生，就是化学从经验科学向理论科学过渡的一个突破；量子化学是化学向微观深入的理论飞跃；计算化学的出现，又把化学和计算机联系在一起，加速了对化学信息的处理工作，加强了化学信息对化学研究工作的指导作用。目前已明显地看到，物理学的原理和方法向化学的渗透，仍然是化学今后发展的重要途径。

由于化学运动与物理学运动有着密切的联系，所以物理学向化学的渗透涉及的范围很广，内容十分丰富，几乎物理学的主要分支学科都对应着化学分支学科。如物理学中有热学、光学、电学、磁学、半导体、核物理和基本粒子物理，在化学中则相应地就有热化学、光化学、电化学、磁化学、半导体化学、核化学和基本粒子化学。在物理学中还有热力学、动力学、量子力学和统计力学，化学科学中就有化学热力学、化学动力学、化学量子力学和化学统计力学，等等。

化学与生物学相互渗透发展的第一个重大成果，是在本世纪初产生了两者的边缘学科——生物化学。生物运动是比化学运动更复杂的运动形态，而化学运动则是生物运动的基础。恩格斯指出：“化学只有通过那些在生命过程中产生的物质才能认识最重要的物体的化学性质；人工制造这些物质愈来愈成为化学的主要任务。”②生物化学的许多发现和深入的研究，完全证实了化学通过认识生命运动的基础物质而加深了对化学运动自身性质的认识。如对生物酶的提取和对其结构的研究，认识到了酶的催化能力是化学物质所望尘莫及的，化学模拟酶的发展，有效地提高了化学催化剂的功能，促进了化学和化学工业的发展；通过对动物体内合成糖的发现及其对结构的深入认识，才算真正理解了新陈代谢的过程；对维生素的发现和深入研究，不仅搞清了动物的许多疾病与缺维

① 《马克思恩格斯选集》第3卷，533页。
② 《马克思恩格斯选集》第4卷，408页。

生素的关系，而且通过认识维生素的结构和人工合成，大大推进了化学结构的研究和合成化学的发展；人们对肾上腺素、甲状腺素、胰岛素等激素的提取和研究，不仅完全证实了化学调节对生命的重要作用，而且也促使化学为医学提供了许多特效药物；蛋白质氨基酸和核酸的发现及其对结构的研究，不只促进了生物工程学的发展，还为结构化学和合成化学提出了新课题，核酸的双螺旋分子结构是其它化学结构课题所不曾遇到的现象。总之，化学研究促进了生物学的发展，而生物学的新发展，的确又极大地促进了化学的发展，模拟生物过程已成为化学发展的重要方向。如模拟生物膜提高化学分离的效率，模拟光合作用可实现用化学方法有效地转化、贮存能量，等等。

自觉促进化学的发展

化学科学的发展有自己特有的规律，化学工作者只有尊重和利用这些规律，才能自觉地促进化学的发展。如实验与理论相适应的发展规律，化学内部各学科的渗透以及化学与其它学科的渗透的规律，导致了化学科学的综合化和理论化，等等。如果化学工作者不适应这一要求，必然会阻碍化学的发展；如果化学工作者主动学习，既有坚实的数学基础，又有广泛的知识面和辩证的思维能力，就能有效地促进化学的发展。

此外则应坚持化学研究为化学生产和新的技术革命服务的方向，以使化学的发展能够具有强大的动力，并沿着理论—技术—生产的科学道路加速化学理论通过技术向生产的转化，推动化学的发展。

还应注意到，从化学的生产活动到研究活动，都是社会化的实践活动。这种集体性的研究工作，完全不同于化学刚产生时的那种个体活动，社会化要求人们的思想和行动必须协调，同时影响化学发展的因素极其错综复杂，也必须通过科学管理进行协调。而且化学科学研究的政策性很强，违犯科学性的事例经常发生，所以，通过科学管理调动广大化学工作者的积极性也是十分必要的。总之，动力和阻力是相互转化的，只有使各种动力因素协调一致，变阻力为动力，才能真正推动化学科学向前飞速发展。

张 道 民

2. 化学发展中认识的历史局限

化学发展的因素是复杂的。化学发展的曲折性，有时是来自传统观念的束缚，比如阿佛加德罗分子假说曾被长期埋没，有时是来自习惯势力的阻挠，比如阿累尼乌斯电离学说提出后所受到的责难。此外，则有时是来自历史局限的认识因素。这就是说，一个化学理论或学说，往往此时看作是正确的，而彼时又认为是错误的了，直至几经曲折反复之后，才能获得一个科学的结论，达到一个认识的高峰。化学发展中普劳特假说的几经否定与肯定，从而推动人们对于元素构成认识的逐步深化过程，就说明了这一点。

普劳特假说的提出

十九世纪初期，在道尔顿原子论建立以后，人们又进一步测出了许多元素的原子量。1815年，年青的英国医生普劳特（W. Prout，1785—1850）对这些原子量进行了比较和分析。他发现，当以氢的原子量为1做标准时，其它元素的原子量均接近于整

数，如碳为6，氧为8和硫为16（实际是当量），等等。据此他提出了一个假说，认为“氢是构成万物的原始元素（protyle），所有元素的原子都是由氢原子聚结而构成的”[1]，所以“所有元素的原子量就都是氢原子量的整数倍”。至于一些表现为非整数的原子量，则是由于实验误差所造成。这就是著名的普劳特假说。

当时，这一假说由于具有一些实验的“依据”，因而很快就得到了杜马和托·汤姆逊等许多著名化学家的支持。1825年，托·汤姆逊在自己的一部著作《通过实验建立化学第一原理的尝试》[2]中，还曾依照普劳特假说把当时测出的一些非整数的原子量，都“大胆”地“修正”成为整数。许多化学家也都这样做了。普劳特假说得到了肯定。

从现代科学的角度看来，普劳特假说所说的“原始元素”是并不存在的，对于原子构成的认识则是过于简单化了。然而却是在科学实验的基础上，第一次从科学的角度提出了关于原子的复合性和结构性，及元素的亲缘性和可变性的科学思想，打破了长期以来认为原子不可分和元素不可变的传统观念，是在朝着探索原子组成和结构的方向上迈出的可喜的一步。但是，由于历史条件的限制，它的科学思想还不可能得到当时科学实践的确凿证明。相反，随着科学的发展，却不断暴露了它的一些细节上的问题，从而使它不得不在经历了几次否定肯定的过程之后才得以最后确认。

精密实验的挑战

1826年，著名瑞典化学家贝采里乌斯，公布了他以高超的实验技巧和严谨的科学态度所测定出的相当精确的原子量表。其中不少元素的原子量都是远离整数的，比如以氢为1做标准时测出磷为31.43、铜为63.42、锌为64.62，等等。这些原子量显然都不能简单地“修正”为整数。这样就引起了人们对普劳特假说的怀疑。1827年，贝采里乌斯在抨击托·汤姆逊那部支持普劳特假说的著作时嘲讽地说：“书中描绘的实验事实似乎是在书桌上而不是在实验室中进行的”。所以自己“对作者所能表示的最大敬意，就是根本不承认该书的存在”。于是普劳特假说也就逐渐被否定而抛之一旁了。

但是，1869年俄国化学家门捷列夫发现的元素周期律却又使它得到了复苏。元素周期律揭示了元素性质随原子量发生周期性变化的关系，从而预示着元素亲缘性和原子复合性的存在。1881年，著名俄国化学家布特列洛夫重新提出了经过修正后的普劳特假说。这样，被遗忘了几十年的学说就又旧事重提、东山再起了。

更加严峻的考验

然而普劳特假说在不久以后就又面临着一场更加严峻的考验。比利时化学家斯达（Stas），在自己从1854到1882年长期从事的精心研究与测定中，已经把一些原子量的准确度提高到了第四位有效数字，从而判定某些元素的原子量不可能是整数或接近整数，比如氯的原子量是35.453，等等。这些确凿的事实，就又动摇了人们对普劳特假说的信赖。正如斯达所说，他自己过去也“几乎完全相信普劳特假说是精确的”，然而现

---

① W.Prout, *Annals of Philosophy*, vi, 321 (1815), vii, 111 (1816).
② T.Thomson, *An Attempt to Establish the First Principles of Chemistry*, London(1825).
③ J.R.柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，219页。
④ J.J.Berzelius, *Jahresber. Fortshr. phys. Wiss.*, 6, 78 (1827).

在则看到，它“只不过是一个假象，是一个肯定与实验矛盾的纯粹假想”而已。1890年，化学家洛·迈尔说，尽管“普劳特假说挺简单，很诱人”，以至在未对原子量做出精确测定之前，曾经“一度为化学家欣然接受”，然而现在是已经无人相信了①。这样，它就再次遭到了否定。

科学仍在向前发展。当历史的时针即将指向二十世纪的时候，法国科学家贝克勒尔（Becquerel）在1896年所发现的元素放射性现象，以及随后人们所提出的元素蜕变学说，却又给普劳特假说带来了新的转机。1910年，俄国科学家库尔巴托夫（V. Y. Kurbatov）据此提出，元素不过“是在周期表上占有固定位置的复合体，是可以相互转变的物质”②。这就又复活了普劳特假说。只是根据尚不够充分。1911年，英国科学家索迪（Soddy）在研究了元素蜕变产物后认为，一种元素可能会含有两种或两种以上的元素变种，即同位素，并在不久之后就得到了实验的证实。这就使人们认识到，通常的所谓纯元素，实际上多是由几种同位素构成的混合物，比如氯元素就是由原子量为35和37的两种同位素组成的，它们各占75.53%和24.47%。所谓氯元素的原子量是35.453，实质是两种氯元素混合后形成的平均原子量。这就表明，原子量为35.453的那种纯粹的、带有非整数原子量的单一氯元素实际是并不存在的。存在的只是原子量为35和37的带有“整数”原子量的两种氯元素。这样也就推翻了斯达所赖以反对普劳特假说的“非整数原子量”的根据，使普劳特假说得到了再次肯定。

新的证实与补充

当时人们对于同位素的本质还不了解。因此，同位素对于普劳特假说的证实也还只是一个间接的依据，还需要找到更直接的证明。1919年，英国物理学家卢瑟福在用α粒子轰击氮以及硼、氯、铝等元素时，从中发现了它们的共同组成部分——质子，实际上也就是最轻的氢原子核。这就是说，氢原子核正是构成所有元素原子的一个部分，从而也就直接地令人信服地证实了普劳特假说的真理性。

但是，认识还有待发展，它还需要做进一步的补充和修正。1932年，英国物理学家查德威克又在元素中发现了另一个共同组成部分——中子。这就使人们认识到，元素的原子组成并非象普劳特所想像的那样简单，而是一个由质子和中子以及电子构成的复杂体系。同位素正是由于质子数相同而中子数不同造成的。另外，质子和中子的质量虽然极为相近而使同位素的原子量极近于整数，然而二者的质量毕竟还是有所不同。因此，以最轻的氢原子量为1做标准所测出的各同位素的原子量，也还不可能像普劳特假说所说的那样，完全恰好是整数。

这样，人们就在二十世纪以来的一系列新的科学发现中，使普劳特假说得到了深人一步的新的证实、补充和修正，从而终于能够对它做出一个全面的科学的结论。

得到的两点启示

普劳特假说几经否定肯定的事实表明，在一定的历史条件下，人们对于自然界的认

---

① J.R.柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，353页。
② 日本《万有百科大事典》15卷，1977年。

识只能达到一定的深度和广度，不可能穷尽它的一切方面，从而总会出现一些曲折反复等复杂情况。这也就是人们认识的历史局限造成的。因此，人们在条件还不具备的情况下，就不应急于冒然地简单地做出绝对肯定或绝对否定的结论，而是应当依照科学实践的标准进行具体地全面地分析。对于一些暂时还不能由实践所完全肯定或完全否定的理论，则应当留待以后更为精确的科学实践去检验，以避免做出片面结论，减少失误。此外，也可看出，人们在探索科学真理的征途中每出现一次曲折反复，也都是在朝着揭示自然界本质的方向上前进了一步，都是在给绝对真理的长河中增添着新的点滴，从而终究还是能够判明出一个学说或理论的真伪或正误。因此，人们就不应为一些暂时出现的曲折反复现象所迷惑和动摇，而是应当坚定信心，在科学实践的基础上，运用科学的思维去执著地追求和探索，直至争取到最终的胜利。

廖　正　衡

3.化学真理的实践检验

化学实践是检验化学真理的唯一标准。这是毋庸置疑的。但是，如何运用化学实践来检验化学真理，却是一个比较复杂的问题。在检验过程中，常常会出现一些假象、错觉和曲折反复等情况，以致一时难以得出正确的结论。因此，就有必要对这一问题做一讨论，以便能比较准确地判明化学理论的真伪，有效地识别和发现化学的真理，促进化学研究工作的开展。

依靠比较精确的化学实践

化学实践是用有限的实验手段来变革无限的自然界的。它对自然界的变革程度总是由浅入深、由表及里而逐步深化的。因此，化学实践做为检验真理的标准，就应当尽可能地比较准确和精密。首先，化学实践本身应当是准确的、可靠的，不含有科学上的错误。否则，就不可能称之为科学的实践，也就不可能成其为检验真理的标准。如果误用这样的“标准”去检验，就势必要造成科学上的错误。这在化学史上是不乏其例的，比如在十九世纪初人们对化合物有无固定组成的问题，曾经争论了达八、九年之久。原因之一就是主张无固定组成的化学家贝托雷所依据的实践结果是错误的。他虽然也分析了铁矿石等许多物质，但实际上他所化验的并不是纯净的化合物，而是不纯净的混合物，从而得出了化合物中元素组成比例不固定的错误结论。而主张有固定组成的化学家普鲁斯特，由于所依据的实验是准确的、可靠的，所以就在这场争论中取得了最后的胜利，并建立了一条著名的化学基本定律——定组成定律。

其次，化学实践本身应当是比较精密的，才能对化学理论进行比较深刻和细致的检验，否则往往会产生一些假象而造成判断上的错误。对流行于十八世纪中叶的燃素学说的检验就是这样。这个学说本来是错误的。它所说的“燃素”，实际上是一种并不存在的臆想出来的“物质”。它认为物质的燃烧就是放出燃素和生成残渣的过程。所以残渣再吸收燃素后就又可复原为燃烧前的物质。这一点，耐人寻味的是，当时看来却似乎已经得到了实践的“证明”。燃素说的创始人化学家斯塔尔，在实验中曾经将金属锡放在火中燃烧，不久，锡果然变成了残渣，从而“证明”了燃素的放出。他再将锡渣同“富

有燃素”的木炭一起共热，锡渣果然又变成了金属锡，从而又“验证”了燃素的吸收。其他化学家的许多实验似乎也都“证明”是如此。于是燃素说就被误认为是“符合”实际的“真理”，并曾足以说明当时所知道的大多数化学现象，以至在十七世纪中叶到十八世纪中叶统治化学界达百余年之久。一个错误的学说居然竟会被误认是科学的“真理”，毛病出在哪里呢？是实践的标准失效了吧？当然不是。错误的燃素说最后还是依靠实践才被推翻的。那么，是实践不准确、含有错误吗？也不是。许多燃素论者的实验也并不能认为是错误的。实际上造成这种情况的一个重要原因就是由于化学实践的精密程度不高。当时的化学实验仅仅停留在表面的定性的粗糙水平，还没有达到定量的精密高度。因而就很难发现燃素说的错误。但是，在更为精密的化学实践的检验下，这一假象也就掩盖不住而被拆穿了。1772年法国化学家拉瓦锡把天平用于化学实验，并对燃烧过程进行了定量的精密的研究，并依靠科学思维的正确分析，终于发现了所谓燃素完全是虚构的东西，从而彻底推翻了燃素说，结束了它的百年来的统治，实现了化学上的一场大革命。

可见，只有依靠准确和精密的化学实践，才能透过现象，深入本质，取得比较可靠的结果。人们要想保证化学实践的准确性，还应当使化学实践的结果具有可重复性或再现性，就是说，可以经得起别人用同样的方法做实验来进行检验，其结果仍然是正确的。另外，还应当辩证地掌握实践标准，避免形而上学。由于化学实践精密程度的历史局限，在一定时期内人们还不能完全证明或完全驳倒现时的全部理论。所以，对于一些因化学实践的精密程度不高而暂时还难以或不能检验的化学理论，就不要急于做出绝对肯定或绝对否定的结论，而应当留待以后更为精密的化学实践去回答。

进行多方面和多次的检验

化学实践作为检验化学真理的标准，一般说来并不是指化学实践中的某一项结果，而是指多方面化学实践结果的总和。因为就某一项具体化学实践来说，都是在一定历史条件下的产物，只能从一定的侧面去检验化学理论的真理性，而很难或不能做到全面的检验。因此，只依靠单方面化学实践的检验，往往会得出片面的、甚至是完全错误的结果。比如人们对惰性元素性质一度产生的错误认识就是这样造成的。惰性元素的化学性质确是相当不活泼而有着“惰性”的。但是它又不是完全没有化学活性。1962年巴特利特发现它们能够同金属铂和非金属氟等元素发生化学反应，并制成了第一个惰性元素化合物（$XePtF_6$）就是一个确切的证明。可是人们根据经典化学键的理论曾经认为，由于惰性元素已经形成了八（二）饱和电子的稳定结构，就“既不能放出电子，又不能获得其他电子”[①]，而是一种完全失去了化学活动性的元素。现在看来这显然是错误的。但是它在1962年以前的半个多世纪里，却似乎得到过长期以来科学实践的“证明”。那时人们在大量的科学实践中的确是从未发现它有过丝毫的化学活动性。检验错误的原因在哪里呢？主要是在于这些科学实践的“证明”只是单方面的或片面的。它们只检验了惰性元素具有化学惰性的一方面，而没有检验到它还具有化学活性的另一面。所以，当人们在1962年第一次发现惰性元素的化学活性，从另一方面也进行了科学实践的检验后，

---

① 〔德〕汉·斯塔夫：《工业实用化学》，冶金工业出版社，1958年，40页。

就暴露了原先检验结果的错误，认识到惰性元素既有惰性而又没有绝对惰性的特征，从而才得到了全面的正确的检验结果。

在检验的过程中还应当看到，化学实践对一个化学理论真理性的检验是不能一次完成的。由于它所受历史条件的限制，用它检验和确证的化学理论，也只能是近似地反映和模写着自然界的规律，而不能一次地全部反映客观世界的各个方面或全部过程，不能完美无缺。实际上，理论和实际所达到的只是相对的统一，而不是绝对的统一。另外，化学实践本身又是随着历史的前进而不断发展的，并不会永远停留在一个水平上，也要不断冲击着这个相对的统一。因此，随着化学实践水平的提高，就需要对于已经被实践检验过的、得到确证的化学理论，不断地运用发展了的化学实践标准进行多次的检验，以使化学理论不断得到修正、补充和深化。

比如，1869年建立的门捷列夫元素周期律，由于它所预言的未知元素均被一一发现，因而就有力地证实了"元素性质随原子量的递增而周期性的变化"的规律性。但是这种以原子量为基础的学说，仍然是对事物本质的不甚深刻的认识。其中还含有几处矛盾的地方。有几个元素不能按原子量递增的顺序来排列，否则就不符合元素性质的实际。后来，在1913年，英国年青物理学家莫斯莱在X射线谱的实验中发现了原子序数，用它来代替原子量的排列，就解决了上述矛盾，使周期律在反映自然界本质上深入了一步。七年之后英国科学家查德威克在α粒子散射实验中又测定出了元素的核电荷值，揭示了原子序数即核电荷数的实质，认识了"元素性质随核电荷数的增加而周期性变化"的规律，从而使元素周期律更为深刻化了。

可见，对于一个科学理论的检验总不能是一次完成的。真理是过程，"永恒的自然规律也愈来愈变成历史的规律"了①。

用科学实践检验理论是一个多次的、无止境的过程，而不能一劳永逸。人类认识的历史告诉我们，许多理论的真理性是不完全的，经过实践的检验而纠正了它们的不完全性。许多理论是错误的，经过实践的检验而纠正其错误。这样才能使科学理论在实践的不断再检验中一次比一次地更正确、更生动、更丰富。

排除主观因素的干扰

化学实践做为检验科学真理的标准，是具有着客观性的，是一个并不依赖于人的主观意识而存在的客观标准。在化学实践的过程中，它的结果一经产生，就变成了客观世界的一部分，变成了不依赖于主体的客观存在和检验真理的客观标准。但是，在化学实践的过程中，人的主观因素总是要参与其间的。因为就化学实践的实质来说，总是人的主观作用于客观自然界的一种有目的有意识的活动，是同主观因素密切相关的。另外，科学实践之所以能够做为检验科学真理的标准，也就恰在于它能够沟通主观与客观、理论与实际，并将二者加以联系和对照，成为二者的桥梁和纽带，由此才得以确定出主观、理论是否符合客观实际和符合的程度。这样，在检验过程中由于主观因素的影响，就既可能把理论和实际统一起来而获得正确的结果，也可能把理论和实际割裂开来而得

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，216页。

出错误的结论。两种可能性都存在。1773年英国化学家普利斯特列本来发现的是能“使化学发生革命的元素”——氧，但是由于他受着燃素学说的长期影响和束缚，却没有让主观去服从客观，进而推翻错误的燃素学说。相反，他却削足适履，硬把客观的结果纳人到旧理论框框之中，主观地认为是发现了什么“脱燃素空气”。因而也就“在真理碰到鼻尖上的时候还是没有得到真理”，做了一件“实践上和理论上的蠢事”。

另一种主观因素干扰的表现是，由于对实践的结果缺乏分析，真实情况不明，从而主观上做出了错误的判断。甚至杰出的科学家费米也曾经有过这样的经历。他曾以为元素凡受中子照射后都必然会生成原子序数增加一的新元素。所以如果用中子照射当时周期表上的最后一个元素铀时，也就必然会得到超铀元素。他为此做了实验并得到了半衰期分别为10秒、40秒、13分和90分的四种放射性元素。但他并没有对这些实验结果进行认真的分析和鉴定，而想当然地认为是人工造出了一些超铀元素。他还轻率地公布了这一“消息”，在国际科学界引起了一场“轰动”。但是实际情况并非如此。费米所得到的并不是几种超铀元素，而是铀核被击碎后所裂变放出的原子碎片。可见，费米并没有弄清实践的真相，并根据核裂变的实际去纠正他的片面认识，而是渗进了主观因素的干扰，错误的认为是“证实”了他原来的“理论”设想，做出了同实际相割裂的错误结论。

此外，在检验过程中如果只企图从实际效果上去证明而不顾及效果和理论的真实联系，也不会得到正确的检验结果。这也是主观因素干扰的表现。本世纪初德国著名药学家艾立希（P.Ehrlich，1854—1915），为了治疗致人死命的昏睡症，想制出一种既能杀死病原体又不会伤害人体的药物。他认为这种药物只应当选择性地为病原体所附着，而不为人体所吸收，一些染料就恰有这种性能。于是他就从染料中去寻找这种药物。他试验了许多种染料都失败了，直到经过反复曲折之后才终于取得成功，制成了有效药物六〇六，挽救了许多患者的生命。他的这种“染料附着”的思想对德国药学家多马克的影响很大。1932年，多马克（G.Domagk，1895—1964）进而对许多偶氮染料又进行了广泛研究，并发现了一种能杀死链球菌的红色染料——百浪多息，为医药事业做出了重大贡献。但是如果企图仅仅从这些实际效果就判断出“染料附着”思想的正确，却又是主观主义的。因为后来的实践表明，六〇六的药效并不在于它对病原体的“附着”，而在于它改变了病原体的代谢方式。此外，经法国化学家特雷弗的研究发现，百浪多息的药效全然不在于它的红色染料性质，而在于它含有氨苯磺胺的组分。但是氨苯磺胺则根本不是染料。所以，不能孤立地单从效果上去考察，把实际效果同错误理论强拉硬扯在一起，篡改实践的客观内容，歪曲实践活动的性质，认为“有用即真理”或者“只有效果才能区分认识和谬误”。这是实用主义的观点，唯心主义的标准。事实上一个错误的学说也可能得到暂时的实际效果，但并不能因此就证明它是真理；反之，一个正确的理论也可能暂时遭到失败，但也并不能因此就推断它是错误的。总之，实用主义的“效果”，实质上是一种主观需要的满足。可见，只有把实际效果同科学理论统一起来，才能判断出理论的真理性与否。毛泽东同志指出：“唯心论者是强调动机否认效果的，机械唯物论者是强调效果否认动机的，我们和这两者相反，我们是辩证唯物主义的动机和效果的统一论者。”①

---

① 《毛泽东选集》合订本，人民出版社，1967年，825页。

十九世纪德国著名诗人歌德（J.W.V.Goethe，1749—1852）说："一切都是多少具有弹性、摇摆不定的，一切都是可以这样或那样处理的，但是自然从来不开玩笑，她总是严肃的、认真的，她总是正确的；而缺点和错误是属于人的。自然对无能的人是鄙视的；她对有能力的、真实的纯粹的人才屈服，才泄露她的秘密。"①对于依靠实践检验自然科学真理的过程也将是这样。检验的结果虽然也暂时会表现"多少具有弹性"或"摇摆不定"，表现出相对性。但是就在这种相对的"不确定"中却包含着绝对的确定性，从而使人们能够"从暂时中找到永久，并且使之确定起来"②。所以，检验的标准又"总是正确的"，确定的，具有着绝对性。这一不确定和确定的对立统一，相对和绝对的对立统一，正是检验真理过程的精髓。深刻领会这一点，就既不会使人的认识陷于僵化，又不会导致怀疑论和不可知主义。所以，人们在检验过程中只要努力排除主观因素的干扰，不为一些假象和错觉所迷惑，坚持不渝地贯彻"实践是检验真理唯一标准"的科学原则，最终就一定会取得正确的结果，揭示出自然界的奥秘。

廖 正 衡

4.化学元素发现的统计分析

目前，直到1983年7月为止，人类已经发现和合成了109种化学元素。这些元素按其核内质子数的量已经排到109号。

在化学元素发现或合成的漫长历史中，有许多化学家付出了艰苦劳动。对于他们的生平和事业，化学史家们已经做了许多研究，这显然都是十分必要的。但是，到目前为止，对化学元素发现史的研究，尚多属列举史实，而缺乏较深入地分析，尤其是很少用数学统计的方法进行研究。为此，这里拟根据科学史上的事实，从以下五个方面做一统计分析，以便从中得出一些规律性的认识。

化学元素发现的时间统计

这里，我们把1731—1982年的251年中的每10年发现的元素都列于表2.5中，并以时间为横轴，每10年发现元素的数量为纵轴，描绘出发现元素的历史曲线（图2.2）。对于在1731年以前发现的元素也列在表中，统做为古代时期的成果。应当说明的是，对于科学史上尚有争议的元素，笔者只能按自己的判断来确定它的发现的年代，这样做虽然可能有些武断，但是对于统计的结果并不会有什么影响。

从以上的统计图表中，我们可以明显地看出，第一峰是出现在古典化学的分析时期（1771—1800），在30年中发现了9种化学元素。

第二峰是出现在电化学兴旺发达的时期（1801—1830），由于电解装置进入了化学，在30年中发现了26种化学元素，平均每一年零两个月就发现一种新元素。

第三峰是出现在光谱分析蓬勃开展的时代，本生和基尔霍夫创立光谱分析之后，很快就发现和确证了一大批元素，在30年内发现了24种化学元素（1861—1900）。

① 《歌德谈话录》，人民文学出版社，1978年，183页。
② 《马克思恩格斯全集》第20卷，577页。

表2.5　元素发现的时间统计表

(1731—1982)

年　代	发现的元素	数量	年　代	发现的元素	数量
1730年以前	Cu Ag Au Zn Hg C Sn	14	1861—1870	Rb Tl In He	4
	Pb P As Sb Bi S Fe		1871—1880	Ga Sc Ho Tm Yb Sm Gd	7
1731—1740	Co	1	1881—1890	Ge F Dy Pr Nd	5
1741—1750	Pt	1	1891—1900	Ar Kr Ne Xe Rn Po	
1751—1760	Ni	1		Ra Ac	8
1761—1770	H	1	1901—1910	Eu Tu	2
1771—1780	Mn N O Cl	4	1911—1920	Pa	1
1781—1790	W Mo U	3	1921—1930	Hf Re	2
1791—1800	Cr Te*	2	1931—1940	Tc Fr At Np Pu	5
1801—1810	K Na Ce B Pd Rh Os	15	1941—1950	Pm Am Cm Bk Cf	5
	Ir I Ta Nb Ca Sr Mg		1951—1960	Es Fm Md	3
	Ba		1961—1970	No Lr Ku Ha	4
1811—1820	Li Cd Se	3	1971—1980	106 107	2
1821—1830	Br Ti Th Be Si Al Zr V	8	1981	合成新元素，寻找超重岛	
1831—1840	Ta	1		元素，1982年10月西德宣	
1841—1850	Ru Y Tb Er	4		布合成了109号元素	
1851—1860	Cs	1			

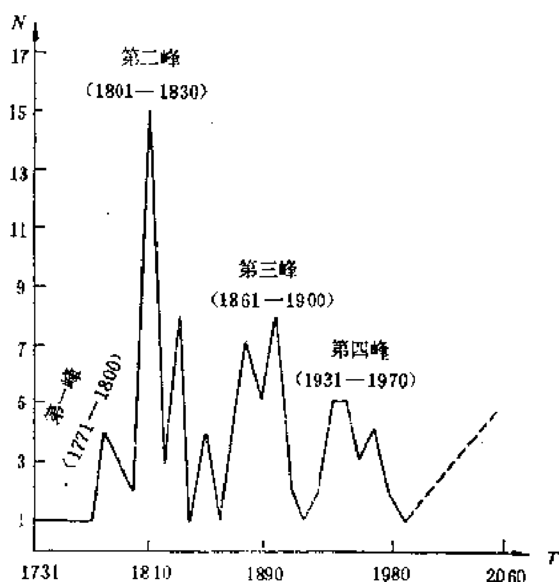


图2.2　元素发现的时间统计图

N—每10年发现的元素数，T—从1731年起，每小格代表10年

第四峰是出现在现代化学时期，原子蜕变现象发现以后，人们制成了加速器，并用以大量合成新元素。在1931—1970年的40年中发现和合成了17种新元素。

不算古代，元素发现史的四个峰，对应着四个时期。因此，可以有理由说，以前某些谈元素发现史的著作，或单纯按着年代分期（例如分成古代、近代、现代等等），或按着某种理论体系的建立与发展分期，都是缺乏说服力的。比较适当的分期方法，应根据化学实验工具的改进或革新来进行。马克思在《资本论》第一卷中指出：“要认识已经灭亡的动物的身体组织，必须研究遗骨的构造；要判别已经灭亡的社会经济形态，研究劳动工具的遗物有相同的重要性。划分经济时期的事情，不是做了什么，

而是怎样做，用什么劳动手段去做。劳动手段不仅是人类劳动力发展的测量器，而且是劳动所在的社会关系的指示物。”马克思的这段论述，不仅是研究社会发展史分期的指南，而且也是研究化学元素发现史分期的指南。

化学元素发现史不同年代的统计曲线，呈现出波浪式，除了和实验工具的改进有直接关系以外，还和社会生产状况有着紧密的联系。因为，实验工具的进步和生产力的发展是密切相关的。从统计曲线我们很容易看出：

第一峰出现在资本主义的大生产在欧洲形成和发展时期，这个时期的生产力的发展，比漫长的封建社会要快得多，特别是在采矿业比较发达的瑞典和冶金工业比较发达的英国，化学发展十分迅速。

第二峰出现在蒸汽机广泛使用的时代，由于工业动力的发展，促进了航海、采矿、冶金和其它工业的发展，因而也促进了化学工业的出现。

第三峰出现在发电机、电动机时代，这时由于工业动力的进一步发展，工业生产大幅度地增长，化学元素的发现也相应地出现了高潮。

第四峰出现在生产和科学技术高度发展的现代。

元素发现史的统计曲线中，波峰和波谷的出现，新化学理论的确立，也有重要的指导作用。例如，科学的元素概念和正确的燃烧理论的建立并逐步为化学家们所接受，促进了第一峰的出现；原子论的确立和电化学理论的发展导致了第二峰的出现；周期律的发现，促使了第三峰的出现；现代核物理学、量子力学和量子化学的发展，正确地指导着人工合成新元素的工作，因而出现了第四峰。

另外，化学元素的发现，也同化学家的思想方法和研究方法有关，同当时当地的社会环境有关，但是在相比之下，起关键作用的还是实验工具本身。实验工具，是人类认识的物质化，也是人类感官的延伸和加强，工具集中地代表了人类认识世界和改造世界的能力和水平。因此，归根结底还应以实验工具作为元素发现史分期的主要依据。

元素发现的地区统计

我们对十八、十九、二十这三个世纪内发现元素的地区进行了统计分析，从而可以找到不同历史时期发现元素的中心所在。

首先，把三个世纪中各国发现的化学元素列于表2.6，然后根据统计资料作图2.3。

古代发现的元素主要集中在中国、印度、希腊和罗马等几个古代国家中，而且发现的元素又大致相同。由于生产力和科学水平所限，当时主要是发现了那些处于游离态或易于还原的元素。为了便于分析我们把它们放在一起统计。

从图2.3和表2.6可以明显看出，在古代发现元素的几个国家中，我国占有重要的地位。有些元素，在我国已使用了几个世纪之后，欧洲才发现使用。但是到了十八世纪以后，发现元素的中心转移到了欧洲。其中最先进的是瑞典，居于第二位的是英国，第三位和第四位的是法国和德国。到了十九世纪，由于英国的崛起而很快超过了瑞典；德国和法国也急起直追，大有同瑞典并驾齐驱之势。跨入二十世纪以后，元素发现的中心很快转到了美国。美国的崛起迅速，几乎完全取代了瑞典、英国、法国和德国，取得了统治地位。在近80年的时间里，美国发现和合成的元素，比其他所有国家发现或合成的元素的总和还要多50％以上。另外，二十世纪以来，苏联发现和合成元素的情况

表2.6 不同世纪发现元素的地区统计表

（在统计中，两个以上的国家共同发现的化学元素按分数计算）

年代	国家	发现的元素	数目
1730年以前	中国、印度	Au Ag Cu Fe Sn Pb Zn	
	埃及、希腊	C S Bi	11
	德国、罗马	P As Sb	3
十八世纪主要指 1731—1800	瑞典	Co Ni Mn Cl F Mo O($^1/_2$)	$6^1/_2$
	英国	Pt H N Ti O($^1/_2$)	$4^1/_2$
	法国	Be Cr	2
	德国	U Zr	2
十九世纪 1801—1900	瑞典	Ca($^1/_3$) Ce($^1/_2$) Er He($^1/_4$) Ho La Li Sc Se Si Ta Tb Th Tu V	$13^1/_{12}$
	英国	Ar Ba B($^1/_3$) Ca($^1/_3$) He($^1/_2$) Ir Kr Mg Ne Nb Os Pd K Na Sr Ti Xe Rh	$16^1/_6$
	法国	Ac B($^2/_3$) Br Ca($^1/_3$) Dy Ga Gd He($^1/_4$) I Po Ra Sm Yb	$11^1/_4$
	德国	Al Cd Ce($^1/_2$) Cs Ge In Pr Rn Rb Nd	$9^1/_2$
	其他	Ru Te W Y	4
二十世纪 1901—1981	美国	Es Am At Cf Fm Ca Md Np Pu Tc Bk No($^1/_2$) Lr 104($^1/_2$) 105($^1/_2$) 106($^1/_2$) Pm	15
	苏联	No($^1/_2$) 104($^1/_2$) 105($^1/_2$) 106($^1/_2$) 107	3
	法国	Eu Fr Lu	3
	其他	Hf Pa($^1/_2$) Pa($^1/_2$) Re	3
合计			107

也是值得人们注意的。十八、十九世纪的旧俄国同我们旧中国的情况差不多，几乎没有任何地位。但是在进入二十世纪以后，则发生了显著变化。虽然在表面上看来，苏联发现的元素并不多，然而进展却是惊人的，许多研究部门的实力都很雄厚，比如设备先进、技术力量很强的杜布纳原子核研究中心，已经同美国的几个重要研究中心〔包括西博格（G. T. Seaborg，美，1912—）领导的研究中心在内〕的水平非常接近，甚至在某些方面还有所超过。

元素发现的中心，一般说来，总是出现在生产比较发达，科研气氛活跃，人才集中的地方，出现在科学热情高涨，重视科学研究工作，并给予科学研究以种种方便和热情

鼓励的地方；出现在科研条件最优越，实验设备最齐全，图书资料最丰富的地方。比如十八、十九世纪的瑞典，虽然是个小国，但有天时、地利、人和的有利条件，国内矿产丰富，开发较早，又有广泛的商业活动和科学技术的交流，长期以来，社会安定，战乱较少，历代瑞典国王对科学技术的研究都采取奖励的政策。因此，国内人民对科学的热情很高，形成了一个以无知为耻、懂科学为荣的社会风尚。同时，瑞典国王还能够注意人才的培养和发掘，荟萃了一大批以贝采里乌斯为代表的科学界的精英，有些外籍学者不远万里。到瑞典定居，搞各类研究工作。因此瑞典在元素发现方面，长期处于领先地位。与此相反，亚洲尽管土地辽阔，资源丰富，人口众多，但近三百年来由于政治、经济、文化、科研等方面长期落后于欧洲和美洲，所以，在元素发现方面出现了长期的空白。

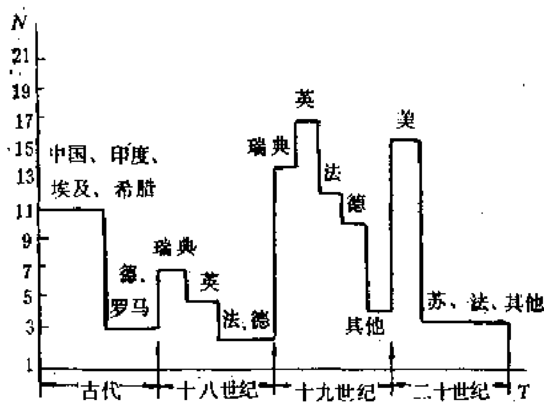


图2.3 不同世纪发现元素的地区统计图
N—发现元素的数量，T—不同世纪和国家

元素发现的组织形式统计

我们把元素发现的组织形式分为：一人单独发现、两人合作发现和三人以上协作发现三类，按着十八、十九、二十等三个世纪分别做出统计图表，如表2.7和图2.4所示。

表2.7 发现元素的组织形式统计表

年代	十八世纪			十九世纪			二十世纪		
组织形式	一人单独	两人合作	集体协作	一人单独	两人合作	集体协作	一人单独	两人合作	集体协作
发现元素的数量	12	8	0	31	16	6	8	6	21

从表2.7、图2.4可以明显地看出，十八世纪个人单独发现的元素占着显著的优势，到十九世纪两人合作和三人以上协作发现的元素明显上升，进入二十世纪以后，科学家集体协作发现或合成的元素则占了明显的优势，近三十年来更是如此。这说明，随着历史的发展，生产的扩大和科学的进步，十八世纪和十八世纪以前那种闭锁单干的科学研究方式，已经逐步被开放的协作的研究方式所取代。人类科学实践的规模越来越扩大，科学研究社会化的程度越来越高，这是一种历史发展的趋势。为了加速科学事业的发展，应当提倡和发扬大力协作的精神，克服保守思想，改变闭锁单干的研究方式，反对狭隘的个人主义和本位主义。

在元素发现史上，有许多科学家协作做出重大发现的生动事例。例如，本生和基尔

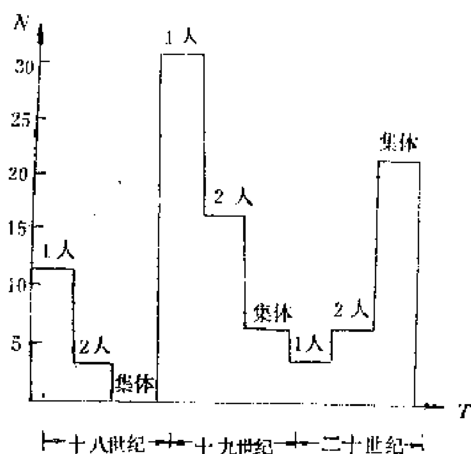


图2.4 发现元素的组织形式统计图
N—发现元素的数量,
T—世纪和发现元素的组织形式

霍夫亲密合作创立了光谱分析，从而发现了一批元素；贝采里乌斯真诚地向其他化学家提供资料和样品，帮助他们发现元素，不计名利，不争成果，一直受到科学史家的赞誉。

一个国家要想使自己的科学事业迅速发展，就应当实行对外开放政策，而决不应当闭关锁国。只有实行对外开放，才能掌握科学发展的动态和趋势，博采百家之长。同时，在自己国家内部，在各个科研领域、部门和团体之间，要大力协同，而决不应当互相封锁，互相保密，这样会无谓地抵消本国的科学能力，阻碍科学事业的发展。

发现元素的人才受教育情况统计

人是认识的主体。所以，在研究化学元素发现史时，应当充分注意对发现元素的人才的研究。

整个元素发现史，主要涉及到93位科学家，他们成长的道路各不相同、有自学成才的戴维和舍勒，也有接受多年系统教育和严格训练的本生、基尔霍夫、贝采里乌斯、西博格、奥吉索等人。为了寻求科学人才成长的规律，对这93位科学家获得发现所必须的科学知识的道路和途径进行一些研究是十分必要的。为此我们对他们的学历进行统计分析（见表2.8、图2.5）。

表2.8 发现元素的93名科学家学历统计表

世 纪	十八		十九		二十	
学 历	自 学	受大学以上系统教育	自 学	受大学以上系统教育	自 学	受大学以上系统教育
人 数	5	12	4	40	0	32

从表2.8、图2.5可以明显地看出，在十八世纪发现化学元素的科学家当中，受过大学以上系统教育的占有明显的优势，但是通过长期艰苦自学而成才的也不乏其人。到十九世纪，在发现化学元素的人才中，受过系统教育的比例显著增加了，未受过系统教育的则相对下降。进入二十世纪以后，发现或人工合成元素的人才，全部受过系统的教育和实验技术的严格训练。美、苏两国制造超铀元素的科学家，绝大部分接受过研究生阶段的教育，并取得过博士学位。这说明，随着科学技术的进步，对认识主体的知识水平和实验技能的要求越来越高，现代科学技术更要求认识主体有丰富的理论知识和娴熟的实验技能。随着科学技术的社会化，对教育也提出了社会化的要求。在现代，闭门造车的教育方式和学习方式，已经不适应社会化大生产和社会化科学技术的要求了。

这就需要整个社会十分重视对科学技术人员的教育和培养。

元素发现史告诉我们，一个国家，一个民族，要想站在世界科学技术的前列，必须注意培养人才，提高认识主体的能力，而要培养人才，就必须发展现代化的教育。美国社会学家哈里特·朱可曼在《科学界的精英》一书中，对美国92名诺贝尔奖金获得者的学历所进行的统计也证明了这一点。在这92名科学家中，82%毕业于美国的13所著名大学，其他毕业于普通大学，所有这些人都读过研究生，且获得过博士学位。他指出：受教育越多、越好的学者，他在以后的工作中，所做出的科学成果也就相应地既多又好。特别是在现代，不经受良好教育的人，在科学上将难有所成，特别是在自然科学和技术科学方面，更是如此。

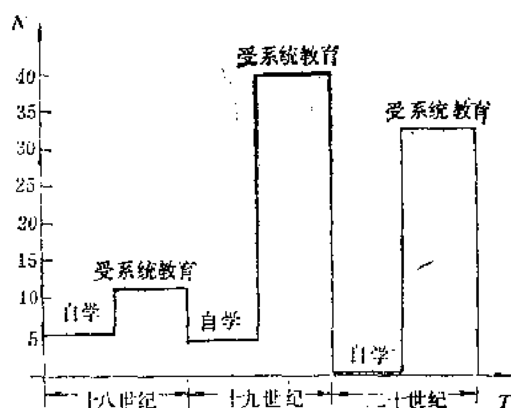


图2.5 发现元素的93名科学家学历统计图
N—人数，T—世纪和学历

93名科学家发现元素时的年龄统计

下面我们对93名科学家发现元素时的年龄做一个统计分析，见表2.9、图2.6。

表2.9 93名科学家发现元素时的年龄统计表

发现元素时的年龄	20—25	26—30	31—35	36—40	41—54	46—50	51—55	56—60*
人　　数	7	14	19	21	15	11	6	0

* 德国物理学家赖赫64岁时发现了化学元素铟。

从统计中可以看出，科学家发现元素时的年龄从20岁到55岁，甚至64岁都有，但最佳年龄是31—45岁，峰值年龄是36—40岁。这说明，年富力强、才华正茂的中年是黄金时代。

以上结论和朱可曼对美国92名诺贝尔奖金获奖者年龄统计的结论是一致的，92名获奖者创获奖项目时的平均年龄为39.2岁。

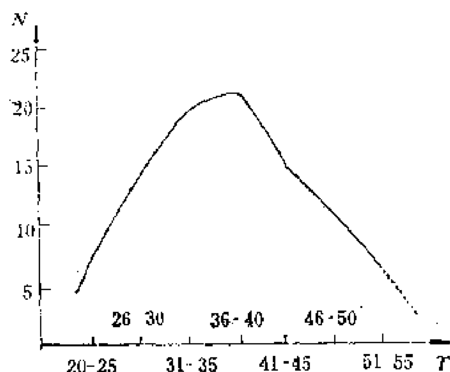


图2.6 93名科学家发现元素时年龄统计图
N—人数，T—科学家发现化学元素时的年龄

从以上的各类统计中，我们可以清楚地看到，一个国家或民族，要想站在当代科学技术的前沿，就必须广泛地激发本国家、本民族的科学技术热情，消除愚昧和无知，而要做到这点，就应当采取各种相应措施，崇尚文化，发展教育，鼓励科研，并在全面普及教育的基础上，重点培养尖端人才。同时还要建立严密而协同的科研机构，这种机构应当做到情报灵、效率高、协作好；机构中的各类成员应当是受过良好教育，热情积

极，年富力强，富有献身精神的专家。

王 德 胜

（五）化学家的哲学思想和科学思想

化学家的活动，特别是他们的哲学思想和科学思想，对于化学的发展具有重要影响。这是认识和掌握化学发展规律的一个重要方面。

应当看到，在化学发展中起过重要作用的著名化学家可以列举出很多，对于他们的哲学思想和科学思想都有必要进行全面和深入地研究，以便能为现代的化学工作者提供一些有益的启示。这里，仅先就几位化学家的情况做一初步考察，以期得到更多的同志能关心和进行这方面的研究，推动化学哲学的发展。

1.波义耳的机械论哲学

从十六世纪起，在欧洲出现了资本主义生产关系。资产阶级要求把生产力从封建束缚下解放出来，并为此而作出了许多努力，从而促进工业生产，包括采矿、冶金、染色、火药等化学工艺的进一步发展。这时，资产阶级也迫切要求认识现实和认识自然，要求发展科学和技术。在哲学的领域内，进步的资产阶级提出了新的、与封建的经院哲学直接对抗的，在当时起着进步作用的唯物论世界观，在认识论方面也出现了以笛卡儿为代表的唯理论和以培根为代表的经验论的新争论。

这种认识论的新争论，与自然科学的发展有着直接的紧密关系。自哥白尼那本不朽著作出版以后，“自然科学便开始从神学中解放出来”，“科学的发展从此便大踏步地前进”[①]。到了十七世纪，自然科学的研究除了原来的天文学和地球上的力学以外，还出现了一些新学科，这就是光学、化学、生理学等的确立。这些新学科的研究对象与原来学科的研究对象大不相同。原来学科的研究对象都是可观察、可测量的宏观物体，像行星的位置、自由落体的速度、单摆的周期等等，这些现象都是直接可以理解的，甚至看得见、摸得着。而新出现的学科，其研究对象却向微观和亚微观领域转移了。对这些新领域探索提出了许多有关认识论和方法论的新问题，这些新问题是哥白尼和伽利略所未曾碰到过的，它们比哥白尼和伽利略时期更加哲理化了。

笛卡儿、霍布斯、胡克和牛顿等在寻求对光线通过棱镜的折射作解释时，都求助于不同大小和形状的粒子（光的微粒论），这些粒子谁也没有见到过。化学家们为了解释化学反应过程，也只好到“不可见的王国”里去采寻答案。古代原子论的思想重新复活并得到了发展，出现了机械论哲学。机械论哲学强调物质由微粒（或原子）构成，微粒或原子是运动的，它们的运动决定物质的各种性质。这些理论中都假设了从直观上难以理解的实体，这些实体与可见的行星、单摆根本不同，因为它们不能被人们直接观察到。于是，从认识论和方法论上就出现了这样的难题：即，人们怎么能够确定这些理论实体的确具有我们实际所赋予的性质？我们到底能不能认识这些实体及过程？用什么方

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，8页。

法去认识这些实体及其性质？这些就是需要回答的认识论和方法论问题。

波义耳这位当时"用机械论方法研究化学的最伟大的代表人物"①，生逢其时，对哲学和科学的发展都作出了重大的贡献。

波义耳哲学思想的特征

波义耳信奉机械论哲学，他的目的是要用机械论的观点来解释自然界，用这种机械论方法研究化学，对各种化学反应进行机械论的描述，摈弃一切超自然的形式和质料，用与一架机器对比的方式来说明各种物质的作用，尤其是要把世界看作是"一座巨大的时钟"②。波义耳认为，依赖于经验的观察应当用机械论哲学来作出说明，而抛弃一切神秘主义的理论。

但当波义耳把机械论哲学具体应用于化学时，却出现了问题。他在谈到化学物质的个别性质及其反应的特殊性时写道："我建议的关于特性本源的微粒论，其重大困难就在于自然物体中实际见到这样种类繁多的特性会起源于这样少的两种因素，而且简单到只是物质和位移运动，这是不能令人置信的。"③因而他认为应该在微粒论上添加一些别的东西。他根据盐能溶于水而不能溶于油或汞，但金子却溶于汞而不溶于水或油，硫又溶于油而不溶于水或汞等等现象，而提出"物体中的变异原理"来解释这些特性。

他强调指出，机械论哲学要对自然哲学发生作用，它就决不能只限于提出一些不能解释自然现象的原理。机械论哲学必须运用已有原理再加上一些新的原理，去解释实验室中观察到的现象。仅仅说火使水沸腾是因为快速运动着的火微粒把水群击破，把水蒸汽送到表面，显然是不够的。他指出，我们必须谨慎地注意去描述火微粒的特殊状态和速度，注意它们击破水群的机制，注意沸腾的规律。他还认为，微粒说要能作出预见和提供解释，不能建立在哲学家所编织的晦涩难懂的神话和特设性判断之上，而要建立在科学家有可能用实验确证的那些原理的基础上，由经验来决定它们的最终命运。他根据"物体中的变异原理"，假定物质的基本原子有各种不同的形状和大小，并以不同的方式运动，或者相互固定在各种不同的次序和排列上，并且在它们的细孔里保持着某些"微妙的流出物"或"发散物"。在波义耳看来，这些"物体中的变异原理"，如同各个字母一样，可以各种不同方式联结在一起形成各种不同的组合，每个组合代表一种化学物质所具有的一套可能的特性。波义耳的这些思想，丰富了机械论哲学的内容，发展了微粒说。可惜的是，他的"物体中的变异原理"没有把当时分散的化学事实系统化，也没有能用实验来证实。

波义耳认识到人们了解事物本质的复杂性，指出微粒说太一般化了，很难详细解释物质的性质。因此，他提出发展低层次理论，即中间理论（处于现象与最终原因之间的中间层次理论）的主张。波义耳指出，这些低层次的、中间理论并不是从微粒哲学中严格演绎出来的，但与微粒哲学不矛盾。他说："存在着大量事物，它们……不可能用任何因袭的方法直接从第一的和最初的原理，即运动和物质原理中演绎出来，但它们必须

---

① 〔美〕亨利·M.莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1980年，123页。

② 同①，124页。

③ 〔英〕斯蒂芬·F.梅森：《自然科学史》，上海译文出版社，1980年，220页。

从从属于这些原理的原理中演绎出来”①。当然，最理想的情况是从第一原理中推演出来，“我们可以渴求直接从第一原理中推出关于事物的知识，但未必总需要也不可能获得这种知识”②。我们不必去追求现象的最终原因，我们所要追求的是直接就可知觉的各种性质间的关系。解释一件事实，就是把这种事实从人们已经了解得比较清楚的另一件事实中演绎出来。这些中间层次的理论比物质和运动概念的普遍性虽低，但却更清楚明白，对自然科学更为有用。波义耳说，“物理学中更加有用的概念……并不是直接从第一原理中推出来的，而是从中间理论、概念和规则中推出来的”③。

波义耳把阐明这些“低层次理论”（或叫作“次要原理”）、“中间理论”当作自己毕生努力的一项重要任务。他认为只有低层次的假设才是真正能够建立起来的假设，“虽然人们不能达到建立完善而普遍的假设；但低层次的公理和假设……却在哲学和人的生活中有着巨大的用途。”④为了给微粒论的形而上学骨架补充以科学的血肉，他深入思考了能够找到并确证这些次要原理的方法。他指出，如果我们用实验或推理证明所有特殊的质都是机械地产生或引起的，这样做，对微粒论毫无帮助，对自然哲学贡献甚微，重要的是要发现并确证次要原理或低层次假设。在这个过程中，波义耳把培根观点和笛卡儿观点很好地结合了起来。波义耳按培根的观点，强调物理学知识的真正基础是实验；他指出，不能停留在对自然界作偶然的观察，而要主动地向自然界进攻。要作系统的而且往往是人为地调整自然界，调整物理世界，以便在非常不同的条件下观察它，也就是，通过有目的的实验去观察自然现象。波义耳认为，一个有眼光的自然哲学家，应该“比亚里士多德学派更经常，要留心地考察经验；不满足于自然界自然地产生的现象，当人们需要找出经验时，他们渴望通过有目的地装备起来的试验去扩大他们的经验……”⑤。波义耳也和培根一样，重视浩瀚的自然史资料的汇集，搜集概括从实验中获得的资料。为此目的，他亲笔写下了许多有关流动性、坚硬度、颜色、冷、空气、呼吸、凝聚、火焰、人体血液、多孔性、液体、锡和火等等的实验资料。

但波义耳问道，我们把这些自然史资料搜集起来做什么呢？是否能按照培根的方式利用它们来引出科学原理和定律呢？波义耳对此问题明确答道：“不”。波义耳不尽同意培根的观点：科学原理将会是通过对自然现象的研究以一种机械论的方式自然而然地涌现出来。

波义耳指出，实验材料只能是为理论家作加工的原材料，理论家以这些原材料作根据提出猜测，去对历史上发生的事件或现象作出因果解释，看它能否说明，从而对这种猜测进行检验。波义耳不相信那种认为理论是从材料中现成地得出来的，或者认为材料是任何一个理论的唯一裁判官。波义耳认为，材料无疑是重要的，因为没有材料就只能无端的欺骗，我们就可能接受一种假的理论，被假理论所欺骗，这种假理论当然也只有通过实验才能作出判别。但是不能由此作出错误的推论，以为理论是从观察和实验资料

---

① *Royal Society, Boyle Papers*, Vol. ix, p. 40；转引自 Larry Laudan, *Science, and Hypothesis*, D.Reidel Publishing Company, 1981, P.35.

② 同上，Vol.viii.p.184；转引自 Larry Laudan, *Science and Hypothesis*, p.36.

③ 同①，p.36.

④ 同③。

⑤ R. Boyle, *Works*, 1772, Vol. V, pp.513—516；转引自 Larry Laudan, *Science and Hypothesis*, 1981, p.37.

中构造出来的；应该认识到，理论不是从资料中自动展现出来的。波义耳尖锐地批评了培根那种对待科学概念的刻板态度，非常重视理性的作用。他认为，一个好的假说要比一个设想得精巧的实验价值更高。波义耳说："恐怕很少有人比得上我对实验怀着深挚的爱和重视了，然而对我来说，如果有人提出某个有创造力的概念，……那么，我就会比他向我透露某个精巧的实验更加感激他"[1]。

由此可见，波义耳既重视实验，又重视理性、重视概念。他认为，要提出低层次原理或中间理论就要重视实验，但不能停留在机械地汇集实验材料上，而是要提出某种假设作为对已经搜集到的材料的暂时性说明。这样，波义耳就在克服机械论哲学的严重不足方面作出了贡献。

波义耳十分重视假设方法在科学中的重要作用。他指出，科学家应当孜孜不倦地、勤勉地进行实验，并仔细搜集种种观察材料，但不要过早地去建立原理和公理，可以提出猜测性的假设，它可以有助于发现真理。为了阐明这个或那个困难，就要提出假说。看看该假设是否具有解决困难的能力，离开现象有多远，这样做可能会有错误，但却可从错误中得到教益。他引用培根的话说：从错误中比从混乱中更容易出现真理。

波义耳认为，理论体系和假设，只要以实验作为先导并且不宣布认为这种理论体系和假设绝对正确，那么它们在科学中起着中心的作用。他指出，人们常常会被表面现象所迷惑，看不到事物内在的本质，假设有时可能不正确，只有作出比较深刻的分析，才能使假设显示出内在的价值来。他打比方说："某些假设就象出售药品中的药店一样。第一眼看到的可能是毒蛇和鳄鱼，还有其他可怕的和有害的物品，但实际上却是有益于人们身心健康的有效药物的储藏室"[2]。所以人们常常要深入到事物的内部，不为假象所迷惑。但错误是不可避免的，最先作出有毒蛇、鳄鱼这些东西，以为是有害的地方的假设，后来才发现它是药品储藏室的正确假设，这是较深刻分析的结果。

波义耳对假设方法的态度，可以从他反驳霍布斯对皇家学会的批判中看出来。霍布斯相信假设对自然哲学是必不可少的，并且反对那些迷恋于培根的经验主义哲学以致根本否定推测或猜测作用的皇家学会会员。波义耳用以下论证答复霍布斯说：皇家学会并不是反对一切假说，而只是反对那些没有现象依据的假说。霍布斯提出，一个好的假说需要满足两个条件：（1）这个假说是可以接受的；（2）这个假说如果被接受了，那它必须能指出现象的必然性。波义耳认为，还应该在这两个条件之上加上第三个条件而且是十分重要的条件，即，"它不能与任何其他真的理论或自然现象相矛盾"。他还说："接受一个假说的充分条件是当我们能够证明它适合于解决现象，而又不与任何已经观察到的现象或别的自然定律发生矛盾。"[3] 波义耳对假说的可接受性作过深入的讨论，指出一个好的假说必须满足以下条件：（1）它不能假定不可能的或荒谬的东西；（2）它应该是前后一贯的；（3）它阐明现象是充分的，或者至少对主要现象的阐释是充分的；（4）它与其它已知的现象和明显的物理理论是一致的。一个卓越的假说，除了满足以上四个条件之外，波义耳认为还应有：（5）它是最简单的假说；（6）它

---

① 同上页注⑤，脚注105，p.37.

② 同上页注⑤，脚注113，p.43.

③ 同上页注⑤，p. 43.

是阐明现象比别的假说阐明得更好的唯一假说；（7）它能使我们预见未来的现象。

波义耳的认识论和方法论思想曾受笛卡儿很深的影响。但又与笛卡儿思想有重要的差别。波义耳坚决主张进行广泛的实验，笛卡儿却并不强调。波义耳不同意笛卡儿把最终原因从宇宙论中排除掉，认为最终原因是存在的，只不过寻求起来很困难罢了。波义耳常常批评笛卡儿所构思的假说体系不严密，构思的方法也不够细致。波义耳说笛卡儿在经验问题上只是唱唱高调，但实际并不重视经验。波义耳认为：笛卡儿的微粒论哲学大部分是从头脑中编造出来的，而不是从经验中总结、提高得来的。此外，波义耳与笛卡儿的区别还表现在，笛卡儿虽然主张微粒说，但却反对原子论学说，因为他认为"真空"不可能存在，而波义耳却指出，借助于抽气唧筒就能产生真空，以捍卫原子论学说。

综上所述，波义耳的哲学思想具有如下特征：

第一，他信奉在当时是进步的、具有唯物主义特性的机械论哲学；但他又结合着自己的科学实践，深化并丰富了这一哲学。

第二，他作为培根的信徒，特别重视实验和搜集丰富的资料，把化学建立在大量实验观察基础上，要求对化学变化作定量的研究。这使他的哲学观点和科学研究工作有着坚实的根基；但他又不完全囿于培根的经验论，而能从笛卡儿的唯理论中吸取合理的因素，重视理性思维和演绎推理的作用，使他具有了比较正确的科学认识论和方法论。

第三，他强调假设方法在科学探索中的作用，这在研究对象从宏观可观测量物体转到微观、亚微观不可见物体的研究工作中，具有十分重要的意义。唯其如此，他才能使自己的主观能动性得以充分具体的发挥。

正因为这样，波义耳不但促进了当时哲学的发展，而且在物理学、化学和生理学等领域获得了重大的成果。

波义耳的哲学思想对化学发展的促进作用

波义耳的全部工作都是在机械论哲学思想指导下进行的。他进行各种各样的实验，目的就在于要对所有的化学反应和物理性质作出机械论的解释。正是在这一哲学思想指导下，他做出了许多重要发现，提出了不少真知灼见，对化学的发展起了很大的推动作用。

波义耳于1661年出版的《怀疑派的化学家》，是化学史上的一部划时代的著作。在这部著作中，波义耳批驳了亚里士多德的四元素说和医化学家的三要素说，给炼金术的理论依据以沉重的打击，在促使十七世纪化学家确立化学的新观点方面起了极大的作用。他第一次给化学元素下了一个清楚的定义，指出"元素"应当是那些用化学方法不能再分割的最简单的物质，"是指某些不由任何其他物体所构成的原始和简单的物质，或完全没有混杂的物质……一切称之为真正的混合物都是由这些物质直接合成，并且最后被分解为这些物质"①。从而把化学确立为科学。

波义耳的这些新思想是以微粒说为前提，强调物质是由原始物质构成，而不是由性质构成。又由于他作了广泛的实验，并在实验中认识到，像黄金这种物质，无论对它怎

---

① 梅森：《自然科学史》，上海译文出版社，1980年，221页。

样处理，既没有得到过“冷、热、干、湿”的“原性”，也没有看到过分解出“盐”、“硫”、“汞”等“三要素”来；他在《怀疑派化学家》中说，盐、硫黄、汞不能从黄金中提取出来。他说，“我用升华法，不难把黄金展成相当长的红色晶体；用许多其他办法也可以把黄金隐蔽起来，组成一些既与金子的本性极不相当而又彼此性质也大不相同的物体，但是这些物体以后都可以还原成它未成混合物前的、同一的数量的、黄色的、固定的、有重量的、有展延性的黄金”①。但由此我们决不要得出这样结论，认为波义耳的元素概念以及对四元素说和三要素说的批判是从这些实验结果中归纳概括出来的。事实恰恰相反，在这里他运用了演绎推理。从他上面这段叙述中我们不难看出，他是用升华法实验否证三要素说，因为如果三要素说是正确的，那么，黄金最后应该分解成，“盐”、“硫”、“汞”三成分或其中的某种成分来，但实际上没有，这才使他有更加充分的理由去怀疑三要素说。也就是说，在他做这个实验以前就对三要素说抱怀疑态度了，他的这个实验只是表明了他的怀疑是有根据的罢了。

那么，他的怀疑思想又从何而来呢？这是需要具体分析的。首先是在这以前他已作了许多研究工作，积累了很多资料；同时在波义耳以前已经有不少哲学家和化学家已经作了大量的工作，与医化学家观点相反的机械论哲学的兴起，原子理论的传播，在波义耳之前为时已久了。

早在文艺复兴初期，阐述德谟克利特、伊壁鸠鲁原子学说的卢克莱修的《物性论》首次出版；希罗的《气体力学》第一本全译本也于公元1575年问世。他们都认为物质是由微粒组成的，当然，这时的理论还停留在观念上，到后来经贝奎恩、沙拉和荷尔蒙特等人的研究，这些才获得了实验根据。“由于积累的事实表明，同一物质通过一系列化学变化始终保持不变，所以自然使人想到微小的原子是经由各个反应步骤后依然不变的物质成分”②。此后又有不少科学家通过实验表明，各自独立的最小微粒是存在的。加齐姆·江格曾用原子概念解释了许多化学反应。他否认铁从硫酸铜溶液中把铜置换出来是一种衍变，只承认这是原子的互换。他们都不同意亚里士多德的原性说，而是用原子概念去说明各种化学反应。

原子观念，机械论哲学经过伽利略、培根、伽桑狄和笛卡儿等人的工作，思想基础已经牢固确立。波义耳是这些正确思想的集大成者，从他自己的实验工作中充分认识到了亚里士多德的四元素说和医化学家的三要素说的可疑，并用更加可信的实验证实了这种怀疑的依据。

当然，波义耳不是只停留在怀疑阶段，而是提出了科学的假设，他的元素概念也可以说是“对已经搜集到的材料的暂时性说明”。正如波义耳所指出的，“理论体系和假说，只要以实验作为先导并且不宣布认为这种理论体系和假设绝对正确，那么，它们在科学中起着中心的作用”③。他自己也没有把他的元素概念当成是绝对正确的，而且事实上他也错把空气、水、火等物质当成了元素，直到拉瓦锡，波义耳元素概念的错误才基本上得到了纠正。但不管怎么说，波义耳提出元素概念对化学发展的意义是巨大的。

波义耳研究过燃烧现象，做过许多燃烧实验。这些实验都是在微粒说理论指导下进

---

① 〔英〕J.R.柏廷顿著：《化学简史》，商务印书馆，1979年，77页。

② 〔美〕亨利·M.莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，121页。

③ 同208页注⑤。

行的。他考察过火的性质和煅烧作用，用他的微粒说对之作了解释。他发现金属在密封玻璃瓶中燃烧后金属灰增重的事实。为了解释这一事实，他认为增重是由于火微粒穿透玻璃与燃烧的金属化合的结果。诚然，他的这一假设是错误的，但依然有着重要意义。首先，他使这种增重的事实得到了说明（尽管是错误的说明），他告诉人们不能停留在对表面现象的观察上，而要透过现象去深入探索事物的内在本质，这在认识论和方法论上是有启发意义的；更为重要的，拉瓦锡正是在包括复查波义耳的实验后才发现波义耳假设的错误，并在此工作的基础上才计划化学革命的。单就这一点而论，波义耳对化学发展的贡献也是不可低估的。

波义耳由于有着比他的同时代人更为正确的世界观和科学方法论作指导，就使他成了十七世纪科学界，特别是化学领域内的佼佼者。但应该指出，机械论哲学以及经验论和唯理论都有致命的弱点，都带有形而上学的成分。这样的世界观和方法论不能不给波义耳的科学工作带来一定的局限性和不良影响。加之由于受到当时科学和技术发展条件的限制，他对四元素说和三要素说的批判并不彻底，他的元素概念并不清楚明晰，以至为后来错误的燃素学说的盛行留下了存在的空隙。但波义耳对化学发展的影响是巨大的，从他开始，化学确立为一门独立的科学，炼金术日趋没落，化学借助于科学的元素论的建立，端正了发展的方向①。

宝 贵 的 启 示

波义耳是一次化学革命的领袖，从他的哲学思想和科学创造中可以获得许多的启示。

首先，波义耳的全部科学活动都是在机械论哲学或“微粒哲学”的指导下进行的。这种哲学在当时是进步的，具有生气的，它是顺应着科学发展的潮流而发展起来的，是与经院哲学中残存的柏拉图和亚里士多德的理念根本对立的。波义耳力求用这种哲学观点对所有的化学反应和物理性质作出机械论的解释，抛弃一切神秘主义理论。恩格斯正确地指出，“不管自然科学家采取什么样的态度，他们还是得受哲学的支配。问题只在于：他们是愿意受某种坏的时髦哲学的支配，还是愿意受一种建立在通晓思维的历史和成就的基础上的理论思维的支配”②。波义耳则态度鲜明地举起微粒哲学的旗帜，清除旧哲学在科学特别是化学领域内的影响，用新哲学观点来说明和描述化学现象，从而作出了重大成果推动了化学的发展。

第二，科学研究工作，尤其是化学研究工作，一刻也不能离开实验，要充分重视观察实验，重视搜集丰富的资料。这是科学活动的基础，没有这个基础，一切都无从谈起。但是，如果要从事创造性的科学活动，那么，除了重视实验之外，还必须重视理性思维。要学习前人的理论，开阔自己的思路，拓展自己的视野，不要被经验束缚住头脑，恩格斯说：“单凭观察所得的经验，是决不能充分证明必然性的”③。所以，要跳出单纯的经验的圈子，要敢于提出有科学根据的假设。从中演绎出新的预见和结论，主

① 廖正衡等：《化学辩证法问题初探》，人民教育出版社，1980年，16—17页。
② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，187页。
③ 同上，207页。

动地去设计实验加以检验。恩格斯给假设作了很高的评价，指出，“只要自然科学在思维着，它的发展形式就是假设”①。波义耳十分重视假设的作用，认为科学离不了假设，他说：“人们猜测性地构思若干线索（即，假设），使我们能去破译用密码所写成的书（即，自然界）”②。这使他发现了许多前人没有发现的规律，提出前人没有提出过的新思想、新观点，推动了化学的发展。

在这里，有了正确的世界观作指导，端正认识路线，掌握并运用正确的方法就具有十分重要的意义了。

第三，要具有破除迷信，勇于创新的精神。前人的学说或理论都是在前人的科学实践和旧有的思想框架内提出的，他们的理论总要受到时代历史条件的限制，因此必须随着新的科学实践的发展而修正和发展，更不能因袭陈腐的观念和拘泥于传统的学说。波义耳以前，亚里士多德的观念虽然在物理学领域内受到伽利略等人的致命打击，但在其它领域中还盘根错节，甚至被奉为经典；以亚里士多德的原性说为其理论根据的炼金术流行了千余年，根深蒂固，受到人们的普遍推崇，但波义耳能够在前人积累起来的知识基础上，并以自己的科学实践经验作依据，对之大胆怀疑。正是由于波义耳的这种敢于怀疑批判和勇于创新立异的科学革命精神，才使他有可能把化学确立为科学，并作出其它许多重要的新贡献。

波义耳为科学和哲学的结合，并作出杰出贡献提供了一个范例，值得我们科学工作者和哲学工作者认真学习和研究。

金　吾　伦

2. 凯库勒的科学思想

凯库勒是十九世纪德国最杰出的化学家之一。1847年人德国吉森（Giessen）大学学习建筑专业。这期间，由于受到当时最卓越的化学家之一的李比希的影响，而对化学产生了强烈兴趣。1852年获吉森大学哲学博士学位。后来，凯库勒又得到了许多著名化学家，例如杜马、日拉尔等人的帮助和指导，使他能集百家之长，形成了自己敏锐的科学思想，并得以在一生中做出了许多伟大的科学发现③。例如，提出了碳的四价和碳可以形成碳链的学说，奠定了近代有机化学结构理论的基石；而苯结构学说的提出，又使有机化学不管是在理论上还是在实际应用上都发生了巨大变化。因此，凯库勒曾被后人誉为有机化学结构学说的奠基人，化学的建筑师，有机化学世界的伟人等等。本文主要是根据以上两个发现的史实，概略地分析一下凯库勒的科学思想基础。

凯库勒苯结构思想的来源

十九世纪上半叶，化学界出现了一种不可容忍的混乱情况：对不断出现的繁多的化学事实，没有一个完善的理论可以统一认识。例如，有人从尿中析离了尿素（1773年），

① 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，218页。

② 同208页注⑤。

③ E.W.Hiebert, *J.Chem, Educ.*, 320 (1959)。

从马尿中析离了马尿酸（1829年），从动物脂肪中析离了胆固醇（1815年），从鸦片中析离了吗啡（1805年），从煤气中发现苯（1825年），用苯和硝酸制得硝基苯（1834年），进而合成苯胺（1842年）和苯胺紫染料（1856年）。可是，这些化合物是怎样形成的？各类物质之间有什么联系？人们并不清楚。这时，早期的生命力学说已经彻底破产。1842—1843年，法国化学家日拉尔在杜马学说的基础上提出了“类型论”，企图将有机化合物系统化。“类型论”是根据某些化合物之间的相似性，把化合物归纳成四种简单的类型：水型、氢氯酸型、氨型和氢型。但是，类型论并不能完全反映出分子的化学性质及分子的真实结构，一个化合物往往可以用几个式子表示。特别是由于日拉尔的哲学观点上的形而上学思想，使他认识不到依据化学性质可以了解分子结构，致使大多数化学家感到迷惘，觉得有机化学象是“一个可怕的、无穷尽的丛林，看来似乎无路可出，因而使人不敢入内。”①

凯库勒当时的思想，一方面受到日拉尔的影响，使他认为一个化合物可能有好几个“合理”的式子，如他在1861年写出醋酸有19个不同的化学式；但另一方面，他又发展了日拉尔的类型论。他继承了弗兰克兰提出的化合价的理论，提出碳是四价的重要概念。1857年，凯库勒在日拉尔的四种类型的基础上又加了“沼气型”（CH_4），归纳了很少的几个碳化合物（如CH_4，CCl_4，CO_2等）。1858年，凯库勒把沼气型扩充到所有的碳化合物，并重新采用日拉尔的原子量，发现碳是四价的规律。他写道：“化学家认为是一个原子碳的量总是和单原子元素四个原子或双原子元素两个原子化合；总之，与一个碳原子化合的元素的化学单位的总数是四。”②与此同时，他还提出一个在当时是突破性的基本概念——根据乙烷（C_2H_6）等分子，碳原子彼此之间可以结合成为碳链。“对于含有几个碳原子的物质，必须承认化合物中至少有一些原子被碳的亲合力所吸引，并且，诸碳原子彼此也连结在一起，从而，一个碳原子的一部分亲合力被另一个碳原子相等的一部分亲合力抵消。”③这些概念的提出，对于研究有机化合物的分子结构是非常重要的，可以认为是奠定了有机化学近代结构理论的基石。因为从此以后，有机化合物的分子结构大体可以用结构式表达出来了。

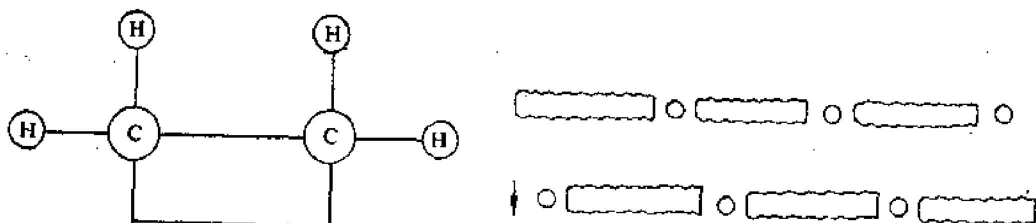
凯库勒苯结构思想的形成过程

凯库勒提出的苯结构学说，是科学史上的一个极重要的假说。科学假说是根据已知的客观事实和科学知识，对未知的客观现象及其规律作出假定性的说明。它的第一个特点就是以一定的事实为依据，产生的最深厚的根源是社会实践。正如恩格斯指出的：“科学的产生和发展，一开始就是由生产决定的。”④十九世纪中叶，由于钢铁的需要量激增，随着钢铁工业的发展，炼焦工业开始兴起，而炼焦生产的同时得到大量煤焦油。当时工业的发展使化学家已经能够从煤焦油中提取出一系列的芳香族化合物。如1825年发现苯，其后又知道了甲苯、二甲苯、萘、蒽等等。运用碳的四价及碳链学说只能说明脂肪族化合物的构造，对芳香族化合物，虽有人假定存在着由六个碳原子组成的

---

① 摘自R.T.莫里森、R.N.博依德：《有机化学》上册，科学出版社，1980年。
② A.Kekule，*Ann.*，C6，129（1858）。
③ A.Kekule，*Ann.*，106，129—151（1858）。
④ 《马克思恩格斯选集》第三卷下，人民出版社，1975年，523页。

六价原子团等等，但还没有人说明原子团的构造。当时已知芳香族化合物有以下特性：碳的比例比脂肪族高，与脂肪族化合物相同，有大量的同系物；最少有六个碳原子；强烈反应时常分解出一部分碳。所有芳香族的衍生物都具有某种同族的共同点。关于芳香族的分子结构，一直是长期困扰化学家的课题。1858年，凯库勒从碳是四价并能相互结合成碳链的概念中，提出苯（尤其是萘）中碳原子彼此之间比大多数有机化合物更加靠近的想法，1859年，凯库勒已模糊地认识到碳原子之间可以存在重键；1862年，艾伦迈耶尔（Emil Erlenmeyer，1825—1909）提出乙炔中存在三键；1864年，布朗（Crum Brown，1838—1922）把乙烯的结构式写成下式：



其中出现了双键；同时，迈尔提出乙烯含有两个未饱和的亲合力，因为乙烯分子通过加成很容易同两个氯或溴原子化合。1864年，凯库勒根据这些线索，曾提出苯的结构的面包卷式形状[1]（如上右图）。由于它与苯的性质迥然不同而迅速被否定。

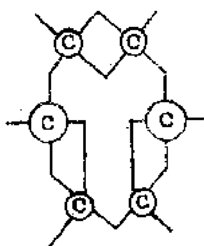
正是在这个漫长的探索真理的过程中，胜利的曙光开始透露。凯库勒早年由于受到过建筑师的训练，具有一定的形象思维能力，能把模型建筑和化学结构结合起来；又善于独立思考和汲取别人的精华具有较高的理论思维能力，从而把化合物的性能和结构联系起来。到了1864年冬，凯库勒终于悟出了一个新奇而又简易的设想：碳链有时能两端连接起来形成环。凯库勒曾生动地描述当时他产生这个设想的情形："我坐下来写我的教科书，但工作没有进展；我的思想开小差了。我把椅子转向炉火，打起瞌睡来了。原子又在我眼前跳跃起来，这时较小的基团谦逊地退到后面。我的思想因这类幻觉的不断出现变得更敏锐了，现在能分辨出多种形状的大结构；也能分辨出有时紧密地靠近在一起的长行分子；它们盘绕、旋转、象蛇一样地动着。看！那是什么？有一条蛇咬住了自己的尾巴，这个形状虚幻地在我的眼前旋转着。象是电光一闪，我醒了；……我花了这一夜的其余时间，作出了这个假想。"[2]

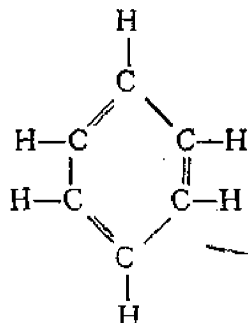
就这样，凯库勒首次满意地写出了苯的结构式，同时也提出了所谓"芳香族化合物"的结构轮廓——含有封闭的碳原子环的化合物，与所谓的"脂肪族化合物"的开链式结构大不相同。1865年，他先用苯的无键六边结构式来表示（Ⅰ），接着，为了符合碳的四价概念，1866年，他画出了一个有单、双键交替的空间模型的草图（Ⅱ），即现在的所谓凯库勒结构式（Ⅲ）[3]：

---

① A.Kekulé, *Bull.Acad.Roy.Belg*, 19, 551—563 (1865).
② A.Kekulé, *Berichte*, 23, 1302 (1890).
③ A.Kekulé, *Ann.*, 137, 5, 129—196 (1866).


（Ⅰ）


（Ⅱ）


（Ⅲ）

凯库勒提出苯的结构式，在有机化学发展史上起到了里程碑的作用。正如1890年3月11日，在纪念苯的结构学说发表25周年之时，权威性的英国伦敦化学会所指出的那样："苯作为一个封闭链式结构的巧妙概念，对于化学理论发展的影响，对于研究这一类及其相似化合物的衍生物中的异构现象的内在问题所给予的动力，以及对于象煤焦油染料这样巨大规模的工业的前导，都已为举世公认。"①

事实正是如此，由于苯结构的提出，使一系列芳香族化合物的结构问题迎刃而解，从而促使十九世纪后半期以后的合成有机化学、尤其是煤焦油的综合利用和染料、医药、香料、炸药等的合成以惊人的速度发展起来，这也说明了"科学技术就是生产力"这一马克思主义的原理。

潜心的研究和科学的继承

科学研究是一个从现象到本质的了解过程，不是直线式的，而是一个曲线上升的过程。人们要正确认识事物，必须先对纷乱事物的现象进行去粗取精、去伪存真、由此及彼、由表及里地改造制作，去抓住本质。因此，在这个过程中可以有长期的、缓慢的、不显著的量变，也可以有短暂的、迅速的、显著的突变；既有经久、艰苦的思索，又有瞬时的顿悟。凯库勒梦见了苯环，并不是唯心的巧合，而就是这种突变、顿悟。由此可见，它也必定是建立在对事物的长期潜心研究和深刻了解的基础上的。一切认识，都是客观事物在人脑中的反映。

凯库勒早年接受了许多著名化学家的指导和帮助，并受到严格的实验技能方面的训练，不仅对有机化合物有深刻的理解，而且思想极其敏锐，善于通过现象寻找事物的本质。他的学生回忆说他始终十分强调独立思考的重要性。凯库勒因此具备了良好的科学发明素质。当然，他具有创造性的见解也是他长年累月深入钻研的结果。1890年，他回忆自己1854年于伦敦做斯登豪斯（J. Stenhouse）的助手时，一次乘坐公共马车时得到的启示，其中有一段话很说明他的钻研精神："一个晴朗的夏夜，我正乘坐末班马车回去，和往常一样，我坐在'外座'上。车子经过伦敦寂静的街道，它在其它时候是充满生气的。我沉浸在梦幻之中，看！原子在我眼前跳跃……。我不断地看到两个较小的原子如何联结起来形成一对，一个较大的如何拥抱着两个较小的；另一些较大的紧拉着三个或四个较小的；同时，它们全都在一个令人晕眩的舞蹈中回旋着。我看到这些大的原子如何形成一条链……。我当晚就花了一些时间记下了至少是这些梦景的梗概"②。从

① 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，185页。
② A.Kekulé, *Berichte*, 23, 1302 (1890).

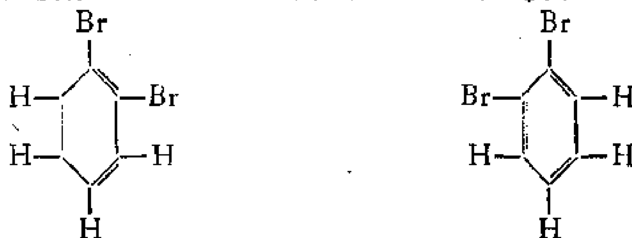
1854年到1858年，又经历了四个年头，凯库勒才形成了一个完整的概念。宝贵的直觉和灵感，正是凯库勒艰苦思考、长期探索的结果。他提出苯结构学说时就是如此。为解决苯的结构问题，他曾经经过了多年思考。平时凯库勒绞尽脑汁、日思夜想。据说他每天只睡三、四个小时①。艰苦的劳动为他创造了产生灵感的条件。灵感的产生常是在无意识的偶然之间，但这偶然中包含着必然的因素，是必然因素的偶然体现。不仅凯库勒的发现是如此，其它的科学发现也是这样。

科学上每一个进步，都是在已有知识和理论的基础上产生的。凯库勒正确地利用原有的化学概念，积极汲取他人的理论精华去分析客观事物，这是其成功的另一主要原因。关于碳是四价及可以结合成碳链的概念并不是凯库勒个人的偶然发现，而首先是在前人的基础上发展起来的。他自己曾经说过："我必须反复强调，我并不认为这些见解的大部分是由我创始的，我宁愿认为除了前面提到的化学家（威廉生、奥德林、日拉尔）以外，他们关于这些问题的细致考虑对我很有助益，其他人，特别是武兹(Wurtz)，也大致具有这些见解。"由于凯库勒理解他的理论大都来自他人（还有弗兰克兰等）的这种情况，所以在他后来的论文中坦率地说，他"在这种思考中只占次要的地位。"②

从类型论到价键理论，再根据价键理论以及碳链的概念去发现芳香族化合物的结构，是凯库勒在其理论上从形而上学到唯物论的前进，是在前人工作和理论的基础上长年艰苦劳动的产物，是事物发展的量变—质变过程，也是历史发展的必然。的确，从当时的化学发展来看，苯结构的发展是必然的。还应该提到的是与凯库勒同时代的英国化学家库帕，他也在1858年独立于凯库勒提出了碳的四价概念。他用键来联结原子，还使用了结构式③。后来库帕因病而中断了工作，于是最后的成功就历史地落在凯库勒的身上了。

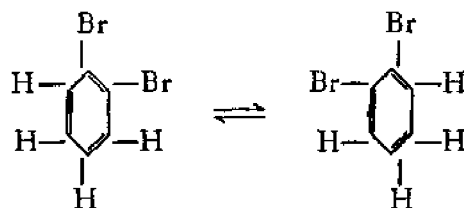
凯库勒苯结构学说的发展

假说不同于科学理论，它具有假定性和猜测性，这是可以理解的。人们的认识过程是一个由实践到认识、再实践、再认识，如此循环往复不断提高的过程。当然，在科学上，一个新的见解或假说的提出，一开始常常可能是不完善或不符合某些事实的。作为一个具有朴素唯物主义思想的科学家，就应该善于通过实践的检验，不断地修正、完善和发展原来的理论。凯库勒苯结构的假说，同其它一切假说一样，也要不断地经受实践的检验和发展。事实上，一个新观点的问世，总会引起种种非议，如当时柯尔贝就曾尖锐地批判过凯库勒的结构式④。按照苯的凯库勒结构式，苯分子中邻位如有两个相同的取代基时，似乎应该有下列两种结构不同的分子，如邻二溴苯：



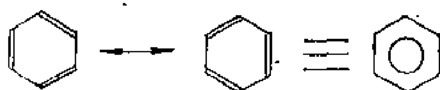
① O.T.Benfey, *J.Chem, Educ.*,35, 21 (1958).
② J.R.柏廷顿，《化学简史》，商务印书馆，1979年，297页。
③ J.Dobbin, *J.Chem.Educ.*, №.11, 331 (1934).
④ Ladenberg, *Ber.Deutsch.Chem.Ges*, 7, 1226 (1874).

它们的区别在于双键和溴的相对位置，但事实上只有一个邻二溴苯。学术之争往往导致一个理论的不断完善。凯库勒注意了这个事实，把苯分子的结构修正为一个能动的状态，即两个邻二溴苯处于快速的变动之中，不能分开[①]：



这样的解释虽然在当时还不可能加以直接证明，但是却为尔后互变异构现象的认识提供了有益的启示。这也可以看出凯库勒在科学研究中的运动论思想。他的这种思想还表现在其它研究中。这就可以说明凯库勒的思想体系已经有了辩证唯物主义的合理内核。

实践是检验真理的唯一标准。从凯库勒提出苯结构以后，经过了后来的多年实践，不断说明有其合理的因素。如用X射线研究芳香族化合物的结构，证实了存在着由六个碳原子组成的平面六角形环，所以苯的凯库勒结构式一直沿用到现在。同时，通过实践也发现了苯的凯库勒结构的缺点。如由于凯库勒结构中存在着三个双键，无论如何不能说明苯没有一般烯烃的容易加成等特性。后来在本世纪三十年代，美国化学家鲍林曾提出了共振论加以补充，认为苯是包括二个凯库勒结构式的共振杂化体：



由于共振而使所有的碳碳键都一样了，并具有介乎单键和双键之间的特性[②]。随着科学的发展，特别是本世纪五十年代以来，由于近代分子轨道理论在有机化学中的应用才使苯的结构得到了圆满的解释。这样，一些过去难以说明的性质，现在已经能够说明了。

为了全面地评价凯库勒，我们在肯定凯库勒在化学史上的杰出贡献及其唯物主义思想基础的同时，也有必要指出由于历史的局限，他在哲学思想上所具有的形而上学的缺陷。如关于元素的化合价问题，尽管当时已有化学家认为是可变的，如磷（P）可以是三价或五价，可是凯库勒却认为是恒定不变的常数。在他看来，PCl_5只是PCl_3和Cl_2的分子化合物；其它如铁的化合价也固定为三；至于二氯化铁，他认为其化学式应为$Cl_2{=}Fe{-}Fe{=}Cl_2$，这显然是错误的。正是由于受形而上学思想的影响，使他在苯的结构问题提出以后，直到1896年去世，在有机化学结构理论上就再也没有什么突出的成果[③]。另外，恩格斯还评介过凯库勒是优秀的自然科学家，但表现出对哲学史的不熟悉[④]。

以上，我们概略分析了凯库勒科学发现中的科学思想，从中可以看出，凯库勒的科

---

① A.Kekulé, *Ann.*, 162, p.77 (1872).
② 参见《化学教育》1981年第1期1页袁履冰的文章。
③ 参见大连工学院《自然辩证法信息》（增刊），1981年第1期50页袁履冰的文章。
④ 《马克思恩格斯选集》第三卷下，人民出版社，1975年，466页。

学发现并非是唯心主义的产物，不是偶然的、毫无原由的“机遇”，也不是凯库勒超人的头脑凭空想出来的。苯结构的提出，是社会历史的必然。凯库勒的假说，是客观实际的反映，是长期艰苦劳动取得的成果。更重要的是，凯库勒在科学上的不断发现，是在其哲学思想上从形而上学到朴素唯物主义、以及具有辩证唯物主义思想的不断提高的过程。

从历史的经验来看，十九世纪中叶的德国由于产生了不少象凯库勒这样的优秀自然科学家，他们的杰出的理论思维，也促进了工业革命的浪潮。如当时的新兴化学工业就是以德国为中心的。正如恩格斯所说“一个民族想要站在科学的最高峰，就一刻也不能没有理论思维。”[①]这是一个十分深刻的论断。

袁履冰　郭黎晓

3. 门捷列夫的化学哲学

近代著名的俄国化学家德·伊·门捷列夫（Д. И. Менделеев，1834—1907）于1869年3月发现化学元素周期律，在科学史上建树了不朽的勋业。他博学多识，兴趣广泛，从事过多方面的科学活动，论著达四百多种。俄国十月革命后，在苏联先后出版过卷帙浩翰的《门捷列夫选集》和《门捷列夫全集》。他在从事化学理论问题研究的同时，还以相当大的精力从事化学教学和化工生产的考察。为尽快改变自己的祖国在经济和文化上的落后面貌，为科学技术事业的进步而献身的精神，贯穿着他一生的全部活动。他之所以能将完成元素周期律的发现，重要的原因就在于他有较高水平的哲学修养，与同时代许多著名化学家相比，这正是他出类拔萃之所在。

门捷列夫哲学思想的形成

门捷列夫的哲学思想是怎样形成的？他怎么会有较高的哲学修养？这都与他所处的社会历史条件，以及他对当时科学家所肩负的历史使命的理解分不开的。

门捷列夫出生在西伯利亚。青少年时代曾与被流放在当地的俄国革命民主主义者有过交往，由于受到革命民主主义思潮的熏陶，使他怀有强烈的爱国热忱，这对于他的人生观和世界观的形成具有重大而深远的影响。1849年他考入了彼得堡中央师范学院，刻苦攻读化学和物理学。他还经常与各系同学交往，参与有关科学、哲学和社会政治生活问题的争论，开扩了视野，磨炼了思想。当时他跟随被称为“俄罗斯化学之父”的沃斯克列森斯基教授学习化学、做实验，受到了严格的训练。在大学期间，门捷列夫的世界观逐步形成，使他较早地理解到：系统地概括整个化学元素之间的相互联系及其规律性，是当时化学家的重大历史使命。后来他曾说：“我在那时，在求学时代，已经感到应该有一种把元素的原子量与其特性联系起来的广泛概括。”[②]实际上，门捷列夫已猜测到了发现元素周期律的历史必然性，并把它作为自己的科学信念而为之献身。

门捷列夫的哲学思想具有那些特征呢？

---

① 《马克思恩格斯选集》第三卷下，人民出版社，1975年，467页。

② *Д.И.Менделеев, Избранные сочинения* Т. I，Госхимтехиздат, стр. 183, 1934.

（1）崇尚理性思维，具有反形而上学经验论的倾向。十九世纪五、六十年代，化学正处在由主要是搜集材料阶段到整理材料阶段的转折时期。化学家们通过实验对无机化学和有机化学的研究已经积累了相当丰富的材料，发现了五、六十种化学元素，约占天然元素总数的一半以上。正如恩格斯所指出的那样：“经验自然科学积累了如此庞大数量的实证的知识材料，以致在每一个研究领域中有系统地和依据材料的内在联系把这些材料加以整理的必要，就简直成为无可避免的。”① 当时英国、法国和德国的一些化学家，如德勃莱纳、奥特林、纽兰兹、尚古都、迈尔等，他们各自用不同的方式，描述了化学元素之间的相互关系，并作出了一定的贡献。由于他们在思想上或多或少地还受着传统的经验论和形而上学的束缚，忽视理性思维，并没有理解到隐藏在他们凭经验制作的元素图表中的规律性。

门捷列夫在其科学活动中一开始就接受了原子论。他后来写道：“原子论的假说，把化学科学残缺不全的经验知识牢固地联系起来，以致使人深信一般自然规律的普遍性和实物在观察者眼前的不可消失性”。他拥护阿佛加特罗的分子说，也批评了道尔顿原子论的缺点，批评了贝采里乌斯的电化二元论。在1860年卡尔斯鲁厄国际化学家代表会议上，他坚定地站在拥护康尼查罗所论证的原子分子说的一边。可见，门捷列夫在其科学活动初期就具有反对经验论和形而上学的倾向。他在新的历史条件下，继承了俄国唯物主义哲学和自然科学的奠基人罗蒙诺索夫的科学发展路线。他确信必须探索化学和物理学之间的有机联系，尽可能把化学导向哲学的认识，才能找到化学过程的合理解释。

（2）重视实验在科学认识中的作用。门捷列夫依据亲身参加科学实验的实践，确信自然规律的客观性及其可认识性。二十一岁的门捷列夫在对同晶现象的研究工作中初露头角。他撰写的毕业论文《同晶现象与结晶形状及其组成的其他关系》颇受化学老前辈的赏识。门捷列夫从这项研究工作中看到了各种不同元素的原子之间存在着相似性。矿物同晶现象的研究孕育着周期律发现的胚胎。在1856年门捷列夫提交的硕士论文《论比容》中，他发现当单质的原子量增加时，其性质便显示出周期性和重复性，从而指出了根据比容对化合物进行自然分组的途径。在这里也孕育着后来把原子体积作为表述周期律的胚胎。在1859至1861年出国考察期间，他还研究了毛细现象，研究蒸汽背离理想气体的现象，走访了西欧的一些科学活动中心，并在后来建立了自己的实验室。他不仅掌握了精确测定原子量的实验技能，还熟悉了不少新发现的元素的资料。所有这一切都为他尔后发现周期律作好了准备。

（3）注意到唯物论和辩证法的结合。自然界本来就是辩证发展的，十九世纪以来由于自然科学的新成就，关于自然现象之间的唯物辩证的意识，已经逐渐渗人人们的头脑，对于具有革命民主主义思想的门捷列夫更是如此。他力图遵循唯物论和辩证法相结合的原则，把经验方法和逻辑方法统一起来。他写道：“观察、假设和实验。观察是第一步，没有观察就不会有接踵而来的前进运动”③。他还认为，任何知识都起源于观察，并要经受实验的检验。他说：“观察和实验是科学的躯体”①。科学规律只有被实

① 《马克思恩格斯选集》第三卷，465页。

② Д.И.Менделеев, Избранные сочинения, Т.Ⅰ, Госхимтехиздат, стр.383, 1934.

③ Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. XV, изд. АН СССР, Л.—М. стр. 138, 1949.

④ Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. XX. изд. АН СССР, Л.—М. стр. 177, 1950.

验所证实，才真正具有科学的价值。他也重视理论的作用。他说："概括，学说和理论是科学的灵魂"①。只有在理论指导下的观察，才知道向哪里观察，才能明确实验的目的性。"在盲目实验和观察的摇摆不定和徒劳无益的道路上，错误就会没有止境。"②

门捷列夫在生前出过八版的《化学原理》是他的心血的结晶，其中有他丰富的教学经验和真挚的科学思想。他在这本巨著和其它有关哲学思想的著作里，曾以非常明确的语言表述了自己的唯物论和辩证法观点，旗帜鲜明地反对唯心论和形而上学。他说："实物对我们来说是永恒的。"③实物离不开运动，"我们所觉察到一切现象，都是运动的不同形式"④。但不能把运动归结为某一种形式。他在《宿愿》中还写道："物质的外在的东西，不管柏拉图和其他哲人怎么说，比起精神的内在的东西来，要产生得更早，更先和更执拗些。"⑤上面所谓的实物就是物质。门捷列夫把自己的哲学称作"实在论"，这是当时俄国思想家和学者用以表达自己唯物主义观点的一种用语，旨在同粗鄙的庸俗唯物主义划清界限。门捷列夫在许多场合，都毫不含糊地批判马赫主义和奥斯特瓦尔德的唯能论以及有机化学中的活力论，批判科学中的降神术、怀疑论和不可知论等等。总之，门捷列夫在哲学根本问题上，是站在唯物主义一元论的立场上，而且具有辩证的特色。

科学思维导致的伟大发现

门捷列夫的哲学思想是怎样支配他的科学活动呢？他的哲学思想同元素周期律的发现之间又有什么关系呢？

（1）在反经验主义中探索。门捷列夫早在求学时代就立志要寻求一种把化学元素的原子量与其特性联系起来的广泛概括，决心献身化学理论研究工作。这在当时不仅不被人重视，而且遇到了不小的阻力。因为当时的化学家热衷于搜集各种化学事实材料，很少思考这些事实之间的相互联系，对理论研究缺乏兴趣。他在《化学原理》第一版跋中指出："单纯地收集事实，即使收集得极其广泛；单纯地收集事实，即使积累得毫无遗漏，都不能使你获得掌握科学的方法。同时，它们既不能提供进一步成功的保证，甚至也不提供命名为科学（在这个词的最高意义上）的权利。"⑥在他从事过的学术研究领域里（如气象学、航空学）都毫不留情地批判了这种狭隘的经验论。他强调指出："只有通过理智和被概括的抽象才能认识现实的东西"⑦。经验论"只是听命于事实，而不是掌握事实"⑧。然而，门捷列夫潜心研究化学理论问题，却得不到他所尊敬的权威学者沃斯克列森斯基和齐宁的赞同。他们一再劝告他去走别人走熟了的道路，比如去寻求新的化合物和元素，而认为搞理论研究是"不务正业"；甚至到1869年门捷列夫已经发表了他所发现的元素周期律的时候，齐宁还训诫他说："到了干正事、在化学方面做些

---

① Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. XX. изд. АН СССР, Л.—М. стр. 177, 1950.
② Д. И. Менделеев, Научный архив, Т. I, изд. АН СССР, М.—Л. стр. 112, 1953.
③ Д. И. Менделеев, Сочинения, VII изд. АН СССР, Л.—М. стр. 65, 1949.
④ 同③, стр. 486—487.
⑤ Д. И. Менделеев, Заветное Желание, Спб. стр, 413—414, 1905.
⑥ Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. XIV. изд. АН СССР Л.—М. стр. 904, 1949.
⑦ Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. XXIV. изд. АН СССР. Л.—М. стр. 457, 1954.
⑧ Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. VI изд. АН СССР. Л.—М. стр. 343, 1949.

工作的时候了。”门捷列夫怀着不被人们理解的痛苦心情，给齐宁院士写了一封长信，为自己所研究的新理论问题进行辩护。他深信自己所选择的方向是正确的，在前进的道路上表现出具有克服任何艰难险阻的顽强毅力。这正是他具有唯物主义的哲学信念作为坚强精神支柱的表现。

（2）依照元素的实际确定研究原则。1865年门捷列夫获博士学位并在彼得堡大学从事化学教授工作时，他深深地感到化学尚缺乏牢固的理论基础，没有一本值得向学生推荐的教材。因为当时化学仍然主要是记述无数零碎事实和现象的经验科学。1867年10月他决心着手编写《化学原理》教科书。他先是按原子价的顺序排列了元素，仍然把元素的原子价作为元素分类的出发点。后来在编写完第二卷前两章，即论述了碱金属元素之后，面临一个重大的抉择问题，即在碱金属元素族之后，是否应紧接着编写碱土金属元素族的问题。如果要紧接着安排编写碱土金属元素族，那就必须放弃按原子价排列元素的原则，而采用按原子量大小去排列元素的新原则。为了寻求新的理论依据，门捷列夫着手比较化学性质不相似的元素族的原子量之间的差值，从而揭开了发现元素周期律的序幕。本世纪五十年代初，苏联学者勃·凯德洛夫根据新发现的门捷列夫手稿，证据确凿地查明：门捷列夫是在1869年3月1日（旧俄历2月17日）这一天做出元素周期律这一伟大发现的。如果他不具有辩证的哲学思维，没有掌握一整套科学研究方法，就不能理解质和量的辩证关系，而要做出这样重大的发现，并在一天之内产生突发性的飞跃，那是不可思议的。

（3）把握事物的质与量的统一。门捷列夫曾多次指出：自然现象的量和质是各种事物最重要的特征，两者具有规律性的联系，认识这种联系，对于化学家具有特殊的重要性。把握质和量的统一，就能找到一条线索使化学家们从片断资料的迷宫中走出来。门捷列夫说：“我自己力求达到这种联系，这种联系是元素周期系的基础。我的全部论证都服从于这个周期系。”① 他指出过去那种孤立研究原子量的状况将使研究陷于被动境地。他说，“元素的原子量在周期律之前是纯粹经验主义性质的数目……，即在这方面不得不摸索着走，屈服于事实，而不是占有它……。”② “周期规律性是由六十年代末期已有的各种比较和验证过的资料中直接得出的，它也是上述资料综合成比较系统完整的表述。”③ 对于门捷列夫坚持把握元素的质与量的统一所做出的伟大发现，恩格斯给予了很高评价，他指出，“门捷列夫不自觉地应用黑格尔的量转化质的规律，完成了科学上的一个勋业。”④

（4）重视研究内容与方法的结合。门捷列夫在从事化学理论的研究中，强调要有“科学的宇宙观”，要“占有科学方法”。他曾形象地描述过自己的方法。他说：科学大厦不仅需要材料，而且还需要设计方案，用科学的宇宙观去拟定科学大厦的模型，“没有方案在已知事实的迷宫里也容易迷途……没有材料的方案或是空中楼阁，或只是一种可能”⑤，材料加设计方案并付诸实施，才能使科学大厦高高耸立。他力求用辩证思维把科学认识中的经验方法和逻辑方法、归纳和演绎、实践和理论之间的关系统一起

---

① Д. И. Менделеев, Основы химии, Т. I, изд. АН СССР, Л.—М. стр. 460, 1947.

② Д. И. Менделеев, Избранные сочинения, Т. II, Госхимтехиздат, стр. 360, 1934.

③ Д. И. Менделеев, Избранные сочинения, Т. II, Госхимтехиздат, стр. 351, 1934.

④ 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，第51页。

⑤ Д. И. Менделеев, Сочинения, Т. XV, изд. АН СССР, Л.—М. стр. 904, 1951.

来，结合起来。在元素周期律的发现过程中，生动地体现了运用科学认识方法的创造力量，显示出辩证思维的巨大指导作用。

凯德洛夫把门捷列夫完成周期律发现的科学认识方法概括为上升法、综合法和比较法。比较法是全面把握元素内在有机联系的一个重要方法。从抽象到具体的上升方法是科学发现的关键。综合法则是把分析与综合、归纳和演绎密切结合起来的逻辑方法，它非常鲜明地显示了门捷列夫辩证思维的特征，对周期律的发现起到巨大的杠杆作用。

回顾人们对化学元素的认识过程，大体经历了个别性、特殊性和普遍性等三个阶段。十八世纪末以前，人们还处在分别研究个别元素的阶段；从十九世纪初开始，就逐渐进入了对于各元素进行分门别类归纳研究的特殊性阶段；到了十九世纪六十年代时这个阶段已经基本结束。因此，如何使特殊性阶段提高到能够揭示出化学元素之间内在联系的一般规律的普遍性阶段，就成为当时摆在世界各国化学家面前的重大课题。然而要解决这一课题还面临着很多困难。当时发现的元素虽然已经有63个，但却只占天然元素总数（92个）的三分之二，而且其中还有11个元素的原子量测得不准确（这是后来才知道的）。此外，对于其中相当一部分元素的物理性质和化学性质还研究得不够，虽然有不少的元素已能按化学性质的相似性划分成自然组，但还对一些元素的性质并不甚了解而无所归属。何况有些已经组成的自然组也还存在不少疑问。所有这一切情况都表明：在十九世纪六十年代，要把认识元素的阶段从特殊性提高到普遍性阶段，是一项相当艰巨的任务。对此，门捷列夫运用了综合的思想与方法。

他在编制元素体系中，首先是对各个化学元素的种种性质进行了比较分析(个别)，然后将相似的同类元素加以组合而为各个元素组(特殊)，进而在比较研究各个不相似元素组的基础上加以综合考察，最后才得到了显示元素周期律的自然体系（普遍）。门捷列夫在这里所使用的综合法，既有归纳法又有演绎法。他把归纳法和演绎法结合起来使用，特别明显地表现在对Be（铍）的恰当处置上。他用上述逻辑方法第一次改正了公认的原子量中的错误，把铍的原子量由13.5改为9.4。随后又更改了Ur、In、Th、Yt、Ce等元素的原子量。凭借这种方法，他还先后预言了15种未知元素，并推算出它们的性能，这些后来都得到了实验的证实。狭隘的经验论者和归纳万能论者，盲目地、不加分析地追随事实，终于成了片断事实的奴隶。他们不了解从个别到特殊，与从特殊到普遍之间有原则的区别；要把不相似的元素联结成为一个整体，必须运用综合法，而单纯地使用归纳法是无能为力的。某些与门捷列夫同时代的化学家，他们在编制元素体系时，有的不能超越自然组的框子，停留在特殊性的阶段（如德勃莱纳、列恩逊的“三素组”）；有的则试图跳过特殊性直达普遍性阶段（如纽兰兹的“八音律”），都没有能够真正地揭示出元素周期律，重要原因就在于他们不懂得，因而也不善于应用这种综合的思想与方法。这是门捷列夫应用辩证思维所出现的奇迹。

门捷列夫还清楚地认识到理论对实验的依赖关系和实验是检验科学真理的标准。他说：“每一个自然规律，只有当它可以产生实际的结果，亦即作出能够解释尚未阐明的事物和指出至今未知的现象的逻辑结论时，特别是当这个规律导致能为实验所验证的预言时，才获得科学的意义。”①1869年门捷列夫发现的周期律，在相当长的一段时期里

① Д. И. Менделеев, Избранные сочинения, Т. I, Госхимтехиздат, стр. 180. 1934.

并没有被化学界公认。在1875年布瓦博德朗在实验室里发现了元素镓之后，又相继发现了锗、钪和其它元素，其中包括惰性元素等事实终于证实并发展了门捷列夫周期律，显示了他的科学预见的真理性。门捷列夫周期律才被公认为自然科学的伟大发现之一载入史册。

化学家应当成为自觉的辩证唯物主义者

从门捷列夫哲学思想的初步探讨中，我们可以得到什么结论和启示呢？

第一，门捷列夫接受了俄国革命民主主义的思想影响，并通过亲自参加科学和其它实践活动，特别是通过元素周期律的发现，使他逐步靠近了辩证唯物主义哲学。他对化学理论一般问题的考察并不是完全被迫的，而是由不自觉到比较自觉的过程。门捷列夫哲学思想的形成，证实了恩格斯在《自然辩证法》中的一个光辉论断："在自然科学中，由于它本身的发展，形而上学的观点已经成为不可能的了。"①门捷列夫哲学思想的形成，是一条"由于自然科学的发现本身所具有的力量"，而"复归到辩证思维的道路"，当然这是一条"充满矛盾和缓慢的"道路②。

第二，门捷列夫的哲学思想对他的科学实践活动有着巨大的指导作用。他直截了当地承认物质世界的客观规律性及其可知性，因而确信自己选择的科学研究方向是正确的，表现出百折不挠、勇往直前的顽强斗志。他重视理论思维，敢于冲破形而上学经验论的牢笼，能够正确看待经验方法与逻辑方法，归纳与演绎的辩证关系。他之所以能在一天之内完成周期律的发现，也并非纯粹偶然，这里充分显示了辩证思维的巨大威力。

第三，门捷列夫还并不是一个彻底的辩证唯物主义者。他不仅在社会历史观上有唯心主义的见解，而且在自然观上也夹杂着形而上学的因素。这些缺陷在他的晚年，由于政治立场右转，表现得很突出。当电子、放射性的发现证实了原子可分和元素可变的辩证观点之后，他仍然维护形而上学的自然观，宣称："承认原子可分解为'电子'……只会使事情复杂化，而丝毫也不能澄清事实……。"③"关于元素不能转化的概念特别重要，……是整个世界观的基础。"④本来原子结构的新发现，将进一步揭示周期律的实质，解决门捷列夫周期表中他所不能解释的问题。可是，由于形而上学思想的障碍，却阻止他进一步发展元素周期系。这一历史教训正好从另一个方面说明了哲学同自然科学的关系。列宁说得很好，他说："我们必须懂得，任何自然科学家，任何唯物主义，如果没有充分可靠的哲学论据，是无法对资产阶级思想的侵袭和资产阶级世界观的复辟坚持斗争的。为了坚持这个斗争，为了把它进行到底并取得完全胜利，自然科学家就应该做一个现代唯物主义者，做一个以马克思为代表的唯物主义的自觉拥护者，也就是应当做一个辩证唯物主义者。"⑤我们这个时代同门捷列夫所处的时代已经大不相同了。在我们这个社会主义国家里，具有许多优越条件，化学家应当努力成为自觉的、彻底的辩证唯物主义者。

林 永 康

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，97页。
② 同上，29—30页。
③ 转引自扎布罗茨基：《门得列也夫世界观》，三联书店，1959年，158页。
④ 同上，159页。
⑤ 列宁："论战斗唯物主义的意义"，《列宁选集》第四卷，人民出版社，608—609页。

4. 普利高津的哲学思想

普利高津（I. Prigogine，比利时，1917—）是1977年度诺贝尔化学奖获得者，耗散结构理论的创立人。

普利高津于1917年生于莫斯科，1929年随家庭到比利时定居，1944年加入比利时国籍。1941年获比利时自由大学博士学位，1957年任该校理学院教授，1959年担任索而维国际物理与化学研究所所长，1967年兼任美国得克萨斯大学统计力学研究中心主任。他还担任过比利时皇家科学院院长，并且是美国全国科学院外籍通讯院士。

普利高津和我国学术界有着比较密切的联系，曾先后多次同中国科学院理论物理所、北京师范大学和西北大学进行过学术交流。我国学者也翻译和介绍过他的著作①。

普利高津对中国古老的科学思想很熟悉，他认为他自己的研究"最终有可能把强调定量描述的西方传统和着眼于自发组织世界描述的中国传统结合起来"②。他曾引用《庄子·天运篇》"天其运乎！地其处乎！日月其争于所乎？孰主张是？孰为纲是？孰居无事推而行是？意者其有机缄而不得已邪？意者其运转而不能自止邪？"他认为，庄子当时提出的问题，从现在来看"对我们依然存在"。在自然科学上，普利高津的一些思想对我们很有启发。

强调化学体系中的不可逆和非平衡

普里高津在早期的研究中就对时间的概念发生了浓厚兴趣。他认为，经典物理学中的时间是可逆的，无论是把+t还是-t代入力学方程，结果都是一样的。很快，他就注意到了热力学第二定律，正如他自己所说的："热力学第二定律把我的注意力全部吸引过去了。"后来，他又"投入了很多的时间从事热力学方法的理论研究。"

通过对热力学定律的研究使他注意到，在自然界中确实存在着"时间单向性这个不可逆现象"。这样，他就从经典物理学认为的"不可逆是一种损耗和'失败'"，进而认识到不可逆的积极意义。他认为："我似乎感觉到生命物质的存在给我们提供了既明显惊人的、同时又是高等有机的体系的样本，其中不可逆现象应该说起着主导作用的。"

认识可逆与不可逆的矛盾，对普利高津创建著名的耗散结构理论起到了先导性的作用。

1945年以后，普利高津的科学思想有了进一步的发展。这时，他的思想不象其他某些自然科学家那样，停留在平衡理论的完美性上，而是探索平衡、非平衡及其相互转化的条件和机制。首先，他精深地研究了非平衡稳定态的最小熵产生原理。他注意到，"最小熵产生原理一般说来只是在不可逆的线性范围内有价值"，并提出："任何化学平衡都是由两种相反过程的补偿来实现的，因此，要研究化学动力学，人们就必须去研究两种相互反向的过程，其中一个过程是在远平衡的、线性范围之外的。"他在这类问题的研究中，"耗费了近20年的心血，即从1947年到1967年，最后终于得到了'耗散结构'

---

① 湛垦华、沈小峰：《普利高津与耗散结构理论》，陕西科技出版社，1982年。

② 同上，Ⅻ页。以下引语均出自此书。

的概念。”

普利高津通过深入研究可逆与不可逆、平衡与非平衡的矛盾，精明地认识到，“与典型的平衡结构不同，在远离平衡的非平衡区出现了耗散结构。”这些成果使他把“注意力的中心已经明显地转移到耗散化学体系方面。”

强调整体性的思想

在普利高津的科学思想中，另一闪光之处，是能够把线性与非线性，局部和整体联系起来加以研究。

经典的动力学理论，从时间的可逆性着手，力图把复杂的现实世界描绘成简单的决定论的线性因果链。这种决定论的思想认为，系统的各要素相互作用是简单的，人们只要知道了它的初态，就可以根据动力学方程推算出系统随时间变化的一系列状态，拉普拉斯当年曾把这种决定论的思想推广到全宇宙。普利高津坚决不同意这种线性的决定论的观点，他认为这是“经典科学缔造的神话”。

普利高津指出，复杂系统的非线性的相干效应，在自然界中发挥着重要作用，并认为“非线性化学的网状结构的行为是非常有趣的”，“在化学动力学中，要实现非线性几乎可以用无限多的方法，例如通过自催化、交叉催化、激活、阻化等等。”普利高津从非线性的相干作用引伸出对事物整体性的看法。他认为，那种机械论的对事物简单性的看法是不对的。耗散结构的一个基本思想，就是认为一个处于远离平衡态的复杂系统，各种要素的相互作用具有非线性的特点，包含着大量粒子协同动作的相干状态，因此必须进行整体性的研究。他认为，“科学的兴趣正从简单性向着复杂性转变。对于微观世界的简单性信念已经被打破了。”他还强调整体性的思想，强调研究“自发的有组织的世界”。

普利高津把线性关系与非线性关系，局部和整体统一起来加以研究，这对他能在科学上取得成功是十分重要的。

强调对立的统一与转化

普利高津十分注重对称和对称破缺的研究。以前物理定律所描述的时间对称性，在进化论和热力学第二定律中发生了破缺。同时，时间的对称性也和生活常识相矛盾。普利高津说：“我们的主要兴趣集中在一类特殊的不稳定性，这类不稳定性是对称破缺的。”普利高津把物理学分为两类：即“存在的物理学”（Physics of being）和“演化的物理学”（Physics of becoming）。在“存在的物理学”中时间是对称的，在“演化的物理学”中时间是不对称的，过程是不可逆的。他通过对不可逆过程的微观理论和熵的研究，实现从存在到演化的过渡，从而把两种物理学统一起来，这也就把物理学中时间的对称和非对称统一起来了。

达尔文的进化论，揭示了世界从无序到有序的发展倾向；克劳晋斯热力学第二定律揭示了世界从有序到无序的演化。这是两个相互对立的过程。普利高津在不违反热力学第二定律的情况下，说明在远离平衡的条件下存在着非线性相干效应的体系。这个体系通过从外界引进负熵流和涨落，可以从混沌无序的状态向新的有序状态转化，从而解决了进化论和热力学第二定律的矛盾，统一了有序和无序，指出了二者的辩证转化。

普利高津指出："生物学和物理学之间仍然存在着巨大鸿沟，这是非常明显的。而按着某些著名生物学家的见解，在空间和功能两方面的有序，乃是生命的基本特性。生命的问题，显然是一个'多体问题'，因为有序的形成和维持包含着大量分子的合作现象。"普利高津的耗散结构理论把有序和无序加以统一，并"想用这个方法讨论生物有序之源，还想说明非线性热力学的新近发展能够使生物学和物理学之间的鸿沟缩小。"普利高津还想通过这些研究，"从中探索出自然科学同生物科学以及人文科学之间的联系。"

普利高津在《时间、不可逆性和结构》一文中，进一步探讨了有序和无序的矛盾及其转化的条件，他指出："非平衡可成为有序之源"。非线性热力学、耗散结构的理论主要结论之一是"认为存在显示出两种行为的一类体系：在一种情况下，趋向最大的无序状态，而在另一种情况下，有相干行为。有序的破坏总是发生在热力学平衡附近。""相比之下，有序的产生总是在远离平衡的条件下（超出具有通常热力学行为的状态稳定区域）才可能出现，并具有特殊的非线性运动规律。"这就指出了有序到无序和无序到有序转化的重要途径和条件。

总之，普利高津关于事物的统一与转化的思想，就使他能够对于对称性和非对称性，有序和无序，有着非常深刻地了解。这是他取得重大科学成果的思想基础之一。

耗散结构思想的普遍意义

普利高津创立的耗散结构理论有很大的普遍性。近年来，随着这一科学思想的发展，越来越受到各门科学的重视，其影响也远远超除了自然科学的范围。它的基本思想，也逐渐被人文科学的各个领域所采用。原因就在于这一理论的主要结论，给人们的思想方法以很重要的启迪。

首先，耗散结构理论认为，新的有序结构的形成，在平衡态或近平衡态都不可能，必须在远离平衡的条件下才有可能。这一原理告诉我们，平衡态或近平衡态有使体系恢复原状的惯性力量，要从一种秩序走向另一种秩序就需要打破平衡。

其次，这一理论也指出，线性关系，简单的决定论的相互作用，不可能出现耗散结构。耗散结构的形成，需要非线性的相干作用。一个复杂系统，是由多种因素决定的，其发展方向也不是唯一的，是由大量因素协同动作来完成的。从而还从一个侧面揭示出协同与不协同的矛盾。

再次，体系要形成和维持有序，体系就必须是一个开放体系，要与外界有物质、能量、信息的交换，在流动中实现有序和维持有序，而孤立的与外界没有物质、能量、信息交换的体系，只能使熵趋于极大，走向无序。因此，封闭的体系是"死结构"，开放的体系才会形成"活结构"，但是，开放体系只是形成"活结构"的必要条件，还不是充分条件。开放体系要形成"活结构"，就必须从外界引进负熵流，引进对形成和维持体系的结构序和功能序有益的东西，而不能引进正熵。正熵只能加速体系的瓦解。

最后，非平衡、非线性能从外界引进负熵流的开放体系，需要通过涨落或起伏才能使体系从一种状态向另一种状态变化，这就是涨落导致有序的原则。普利高津认为，非平衡非线性的开放体系"在通过能量和物质流动而形成稳定结构之前，涨落起着主要作用。"

普利高津耗散结构理论的主要结论，受到了学术界的普遍重视，美国奥斯汀得克萨斯大学的著名社会人类学家R.N.阿丹斯教授在评价普利高津耗散结构理论时指出："耗散结构也是组成人类生命和人类社会的基材"，把普利高津的研究成果"扩展到人类事业中去，这实在太诱人了。"他还进一步认为"对耗散结构及其行为的探讨，为我们了解人类进化的复杂性投射了重要的光芒。"

总之，普利高津对耗散结构理论的研究和总结，使他的科学思想日益精深而明晰，闪烁出辩证法的光辉。他是现代科学家中科学思想最丰富的学者之一。研究他的科学思想，将有助于我国化学事业的发展。

王 德 胜

5.福井谦一的化学思想

日本京都大学教授福井谦一（1918—），由于三十年来以其开创的"前线轨道理论"为基础在化学反应理论领域研究中所取得的业绩，而荣获了1981年度的诺贝尔化学奖。正如在诺贝尔获奖通知中所指出的，"福井谦一和美国康奈尔大学教授霍夫曼（R. Hoffmann）两人各自开创的前线轨道理论、分子轨道相互作用理论和轨道对称性守恒原理等一系列理论概念与方法，已成为解决繁难的化学反应的有力工具，极大地丰富和深化了人们对于化学反应内在规律的认识，是化学反应理论研究中具有里程碑性质的成就。"①

福井谦一早年就读于京都大学工学院工业化学系，并获得了工学博士学位。1941年毕业后一直在京都大学工学院石油化学系工作。1982年退休，为名誉教授。作为应用化学专业出身的福井能够在理论化学、量子化学领域里取得如此丰硕的研究成果，不仅在日本是唯一的，就是在世界上也是罕见的。这样，福井本人及其所走过的通向诺贝尔奖的成功之路，自然也就引起了人们的注目。笔者仅就在同福井教授的相互交往中所获得的一些感受，以及在日本京都大学进行研究工作期间耳闻目睹到的一些情况，做一介绍。

坚 持 走 自 己 的 道 路

中学时代的福井谦一特别喜好数学和德语。他在大阪高中毕业的前夕，受到了著名工业化学家京都大学教授喜多源逸的启发和鼓励，教授对他说，"喜好数学的青年应当去专攻应用化学，在那里有更多的奥秘需要去揭示"②。为此他报考了京都大学工学院的工业化学系。在大学的学习生活中使他益发感到"把化学由经验科学上升为理论科学的必要性"，从而使他暗暗下定了献身于化学基础理论研究的决心。这样，福井就在自己的大学功课表中又增添了许多数学和物理课。他除了学好工业化学系的必修课外，还选修了理学院的数学课和理论物理学课程，其中的数学物理方法和量子力学课使他特别感到兴趣，并得到了著名理论物理学家荒木源太郎教授的亲自指导。这种倾注于研究应用科

① 日本化学同人，《化学》1982年第1期，2页。

② 山边时雄，《ノーベル賞科学者福井謙一，化学と私》，日本化学同人社，1982年。本文所用资料主要引自此书，不另注明。

学中理论问题的热情和才能，在他的博士学位论文“关于化工设备中温度分布的理论研究”中得到了初步的表露。

他毕业后留在京都大学工学院燃料化学系（后改为石油化学系）工作，当时正值第二次世界大战刚刚结束，日本的社会经济一片混乱，当务之急是复兴工业。为此，日本政府以优厚的物质待遇和良好的工作条件，鼓励人们到实业中任职，他的许多同学和同事纷纷转向产业部门工作或单纯从事应用化学技术的研究。但是他却坚定不移地走自己的路。据福井的同班同学小方芳郎教授回忆说：“当时的福井却与众不同，他仍然默默地坚持他的理论研究工作。”①这样，他就在1951年的秋天完成了他的关于前线轨道理论的第一篇论文“芳香碳氢化合物中反应性的分子轨道理论”②，据福井的学生和这篇论文的合作者、京都大学米泽贞次郎教授回忆说：“那时的条件很苦，没日没夜地蹲在小屋子里，用一个小型的手动计算机在计算萘和蒽等芳香分子的前线分子轨道的电子密度，真是忘掉了一切地拼命干啊。”

福井关于前线轨道理论的第一篇论文在1952年的《化学物理学杂志》上发表后，并未引起同行的重视，而且还遭到了一些异议。但是福井坚信自己的看法是正确的，并加紧进一步的研究工作。从不饱和到饱和碳氢化合物、高分子化合物以及生物大分子化合物，在广泛的化学领域里扩展了他的理论，并取得了重要结果。1964年，他在一个特定的协同反应，即狄尔斯-阿尔德（Diels-Alder）反应中首次发现了轨道对称性对于化学反应性的决定作用。这刚好是伍德沃德-霍夫曼（Woodward-Hoffmann）提出轨道对称性守恒原理的前一年。因此，当今化学界许多学者称此原理为“福井-伍德沃德-霍夫曼定律”。此后，前线轨道理论受到国际化学界的日益重视。他提出的“最高占有轨道”（HOMO）和“最低空轨道”（LUMO）等概念已经广为化学界所采用。今天，前线轨道理论和轨道相互作用理论等已成为化学科学基础理论的一部分了。

举止文静、寡言少语的福井教授，他那种四十年如一日地为探索化学基本规律而献身的精神，给接触过他的人以强烈的印象。老同学、老同事们的共同看法就是：“福井君的那股潜在的献身精神，确是十分出众的。”这不妨说是福井教授在科学道路上前进的真正动力。

善于抓主要的矛盾

福井教授四十多年的学术追求是紧紧围绕着探索化学反应的基本规律展开的，其最终目的正如他本人所说，就是要使“理论为广大的化学家，特别是实验化学工作者能够容易地理解和运用，并为分子设计、新材料和新能源的设计提供理论依据”。在具体的研究活动中福井善于吸取前辈学者们在方法论上的长处，并能深入分析大量化学实验材料与已有理论之间的矛盾，然后再凭借他丰富的合成化学方面的知识和锐敏的洞察力，超脱旧理论框架的束缚，深入到事物内部找出带有决定性的主要因素，以抽象成为科学的理论。前线轨道概念的形成就是一例。1951年，他在“关于芳香碳氢化合物中反应性的分子轨道理论研究”一文中，首次运用前线轨道概念通过计算指出，决定芳环上不同

---

① 日本化学同人：《化学》1982年第1期，5页。

② K.Fukui、T.Yomezawa、H.Shingu, *J.Chem.Phys.*, 20, 722 (1952).

位置（如萘分子上的α、β位）的反应活性的是前线轨道上的电子密度值，而不是总电子密度，实际上是找到了事物的主要矛盾而成功地解决了不饱和碳氢化合物的反应性能的本质问题。所谓的前线轨道并不神秘，可以看做是原子的价轨道概念的合理推广。原子中的电子虽然可能很多，然而主要是外层电子即处于价轨道中的电子的行为决定着化学元素的许多性质，这在中学化学中就已有了明确的阐述。它决定着原子间结合成分子时的化合能力和成键状态。对于分子也存在着类似于原子中的起着主要的决定性作用的价轨道。这就是前线分子轨道（FMO）。它包括“最高占据轨道（HOMO）”、“半占轨道（SOMO）”和“最低空轨道（LUMO）”等，正是这些主要的敏感的分子轨道，决定或支配着分子间发生化学反应的难易（即反应活性）和反应进行的方式（即反应机理与反应途径）。

在讨论更广泛的化学现象与化学过程中，前线轨道理论不断得到充实和发展，如六十年代末的多体间轨道相互作用的理论，七十年代初的内蕴反应坐标（简称IRC）理论等，从而使化学反应性理论由定性的、半定量阶段进入到定量化的阶段。从福井及其合作者们已发表的二百余篇论文中可以看到，它们几乎涉及到了化学的各个领域，从无机物和有机物的小分子到有机高分子和生物大分子，从低维电导体到无定形物质等等，在化学与物理学、化学与生物学的边缘区域做出了许多开创性的工作；从普通化学反应到催化过程和溶剂化效应以及生物化学反应，建立了一系列研究反应性的判据与方法。七十年代末期，在相互作用的前线轨道理论中引进了图像化，从而可将反应全过程中的轨道作用特征与电子云的变化情景直观而形象地展示出来，深受广大化学工作者的欢迎。

利用环境优势发展福井学派

福井成功的另一个因素，就是他能够利用他所处的环境的优势，积极发展自己的学派，为化学的发展做出进一步的贡献。

在具有浓厚的应用化学色彩的京都大学工学院的石油化学系里，竟能成长出理论化学的成果，出现量子化学的新学说，并形成了日本唯一的、国际著名的以研究化学反应量子理论的集体——福井学派，是值得令人深思的。

在具有将近九十年历史的京都大学，在学术上素以提倡百家学说，扶植新兴学术见解而闻名于日本。在社会科学方面，最早在日本传播马克思主义学说，研究马克思、恩格斯和列宁的经典著作的左派学者河上肇，和当今著名的马克思主义历史学家井上清，都曾是京都大学的教授。在自然科学方面，迄今在日本获得诺贝尔物理奖和化学奖的四人中竟有三人（汤川秀树、朝永振一郎和福井谦一）都是京都大学出身的教授，这并不是偶然的，而是这种适于培育新学说的学风带来的结果。这一看法在笔者接触到的日本学术界人士中是普遍的。

福井教授在五十年代初期提出前线轨道理论的这一理论化学方面的新见解时，在京都大学工学院的应用化学研究环境中，不仅没有受到歧视，反而得到了当时石油化学系的主要教授们和学校的支持，并且不久就为这位年青的教授提供了专门从事理论研究的条件。福井十分珍惜这一环境提供的条件，在石油化学系里设立了福井研究室。三十年来他利用这个研究室培养出近百名化学博士，其中许多人已经是日本一派的国际量子化学界的著名学者了，如米泽贞次郎（京都大学工学院分子工程专业首席教授）、永田亲

义（东京国立癌中心研究所生物物理部部长）、加藤博史（名古屋大学教授兼基础学院院长）、今村诠（广岛大学理学院教授）、诸熊奎治（国立分子科学研究所教授）和山边时雄（京都大学教授）等。现在，京都大学工学院石油化学系的六个讲座中就有两个讲座是属于量子化学方面的。去年又经日本政府批准新开设了"分子工程"专业，并已招收博士生25名，成了日本第一个培养分子设计、材料设计、催化剂设计和新能源设计方面专门人才的基地。笔者在京都大学工学院石油化学系福井研究室（现山道研究室）进行研究期间，曾亲眼看到他们这种肯于破格在应用科学领地里开辟出一块理论科学园地的做法，以及由此而带来的丰硕成果。这在世界大学教育中恐怕也是不多得的。与那种固执于传统的门户之别和学术偏见占支配地位的大学相比，这种良好的学风是令人羡慕的。在福井教授获奖后所做的多次演讲（包括诺贝尔讲演在内）或同记者的谈话中，都一再提到他的老师、同事和学校所给予的帮助和支持。他在与笔者的交谈中也谈到过这种思想，认为若没有这些帮助和支持，想取得今天的成就是不可想像的。这时使笔者联想到福井的诺贝尔获奖证书上的一幅图案（在一块油褐色的土地上舒伸出几株鲜绿含苞待发的新芽），想到了一棵初发的嫩芽，因为它充分地吸收了沃土中的营养才得以茁壮地成长，并结出了丰硕之果。愿我们的大学也能为那些有才华的年青学者造出适于他们施展才能的沃土，去夺取诺贝尔奖的桂冠吧！

纵观福井的全部科学研究活动，就是他善于分析化学反应中的主要矛盾，并鲜明地贯串着一条从实践到理论、再到实践的路线。即理论来源于实践并在实践中运用，再得到改进与提高后反过来又用之于实践的路线。这样的一条研究路线不正是福井通向诺贝尔奖的"最佳反应途径"吗。用福井的术语来说就是，实践——理论——再实践。这也就是福井教授科学活动的"IRC（内蕴反应坐标）"吧！在自然科学史上，凡是卓有成就的科学家，也大致都是走的这条路线的。今天，当我们来认识福井教授时，这一点就再一次给我们留下了深刻的印象。我想这也许就能多少地回答了开头我们所提出过的问题。这些看来是平凡的真理，然而在实际中若能坚持做到底的话，也是不容易的。谨希望我们能有更多的年青人，走出一条条比前人更好、更快的通达科学高峰的道路。

赵 成 大

三　化学教育的哲学问题

（一）化学教育的历史与现状

1.化学化工教育的历史发展

化学化工教育是适应社会经济与化学化工事业发展的需要而兴起，伴随着生产过程与科学的发展而发展的。同时，生产与化学科学的不断发展又促进了化学化工教育事业的蓬勃发展。“辩证法要求从相互关系的具体发展中来全面地估计这种关系，”[①]坚持历史的方法，从化学化工教育的历史过程中，探讨其发展中的一些基本问题，对发展化学化工教育，促进化学科学和化工技术的发展是非常重要的。

化学化工教育的兴起

近代自然科学是资本主义生产方式兴起的产物。十七、十八世纪的自然科学取得了前所未有的迅速进步。随着自然科学的蓬勃发展，科技教育也在十七、十八世纪兴起。十八世纪的法国教育相对来说比较先进。在1794年，国民议会接受了一些科学家和工程师的建议，批准成立了法国理工学院，相继成立了二十多所大学。在十九世纪里，法国成为世界科技教育和研究的中心，培养出了一大批作出开拓性发现和发明的著名人才。德国从十七世纪末起，开始了对传统大学的改造，摆脱教会的控制，提出了“自由研究，寻求真理”的原则，取消了只为权威作注释的传统，重视自然科学和数学的教学，并强调把技术内容的研究和创造能力的培养结合起来。美国也很重视科技教育，1861年靠私人联合公司的资金建立了麻省理工学院。

随着化学科学和化学工业的发展，化学化工教育也相应地兴起，并逐渐成为教育的一个重要分支。化学化工教育在欧洲发展较早，它伴随着科技教育的发展而发展。到十九世纪初，在大学里就已出现了化学实验教学。二十世纪以来，化学化工教育发展的就更快了。

我国早期的化学教育

在我国出现最早的近代科学书籍，是一位1839年来华的英国医生合信所著的《博物新编》，1855年由上海墨海书馆出版。此书分三集，第一集中讲化学知识，它说到养气（又名生气），轻气（又名水母气），淡气，磺强水（又名火硝油），硝强水（又名水硝油）和盐强水，分别相当于现在的氧气、氢气、氮气、浓硫酸、浓硝酸、浓盐酸。这部《博物新编》注明是咸丰五年（1855年）刊。就目前所知，它是中国最早的一部讲近代化学的科学书籍。中国在十九世纪后期出版的化学书籍，绝大多数出自江南制造局翻译馆诸人之手，中国近代化学伟大的启蒙者徐寿（1818—1884年）就是其中之一。他在

① 《列宁选集》第四卷，449页。

大约十七年间译了十三部书，其中属于化学或与化学有关的有：《化学鉴原》、《化学鉴原续编》、《化学鉴原补编》、《化学考质》、《化学求数》等，这些书籍在当时中国学术界起了推动作用，促进了我国化学科学和化学教育的发展。徐寿本人热心于化学教育和知识交流。1875年，他和在上海的爱好科学的朋友，创立了格致书院。这书院是一所带有学会性质的学校，经常公开演讲化学等自然科学问题，有时还进行"课堂示教"实验（相当于现代初中程度的制造氧气氢气等演示）。这在我国也可算是化学知识普及教育的最初尝试。1876年，徐寿还创办了《格致汇编》月刊，1890年改为季刊。徐寿一生翻译了许多国外的化学科学书刊，他还创办学校与学会，创刊科学杂志，为我国化学科学和化学教育的发展做出了巨大贡献。从十九世纪后期到二十世纪初期，国内化学书籍，除上面介绍的以外，还有很多。例如：徐寿、徐建寅（徐寿之子，1845—1901年）译，由江南制造局翻译馆1868年出版的《格致须知》、《化学分原》、《化学考质》，1902年文明书局出版周柏年著《化学》，1906年，学部图书局出版了周柏年所著《格致教科书》（初等小学用），科学仪器馆出版了虞辉祖著的《理化教科书》（中学用）；1912年至1914年，由商务印书馆出版了王季烈编的《化学》（中学用），王兼善编的《化学》（中学用）和《化学》（师范用、中学用）等等，有几十种化学书，是清末到民国初年的主要化学书籍。这些书都为教科书，在当时对化学教育和化学科学发展起了不同程度的推进作用。

期刊是传播学术的必要工具。世界上化学期刊开创于十九世纪三十年代，这是和学会组织密切联系的。化学学会的建立，英国是1841年，法国是1858年，德国是1868年，美国是1876年。日本在1880年创设东京化学会，到1919年才改为日本化学会。中国化学会是1932年成立的。在这以前，国内和在国外学习的中国留学生也创设了几个规模较小的化学会。例如：1907年由李景镐、曹惠群等留欧学生，在巴黎成立了"中国化学会欧洲支会"，这也是我国最早的科技群众团体。1923年由留美学生组织了"中华化学会"。中国化学会在大约二十年中，先后发刊中外文的化学杂志和进行其它学术活动，对于中国化学科学和化工技术的发展起了一定的推进作用。

中国由国家设立的第一个传授西方学术的机构，是上海广方言馆（1863年设立）。同时期在北京设立同文馆，该馆1898年订立"馆规"，规定学制八年，于第七年学化学课。1899年设京师大学堂（今北京大学前身），1901年又把同文馆并入其中。在二十世纪初，全国新式学堂办了很多，比较有成绩的有京师同文馆、上海广方言馆和南洋公馆，湖北自强学堂、广东时敏学堂、浙江求是学堂等等。在这些学堂中都有化学课程。京师大学堂在二十世纪初年，分大学院和大学专门分科，大学院只做研究，不上课，专门分科有七科，其中有格致科、农业科、工艺科、医科。格致科又分为六个目，其中有化学、物理，农业科中有农艺化学，工艺科中有应用化学、采矿冶金等等。这些科目都是与化学有关的。光绪二十四年（1898年）通谕全国，要求各省、府、厅、州、县都要设学堂。至此，封建科举制的书院废尽。小学毕业升中学，中学毕业升大学。这些学堂都设化学课程。光绪二十七年以后，学堂开始制定系统教育，除大、中学堂外，还有旁系的学堂，如实业学堂，艺徒学堂等，课程中都有化学（如普通化学、定性分析、工业分析、染色等）。清末至现在，全国大、中学中几乎均开设化学课程。绝大多数综合大学都设有化学系，以培养深入探讨和研究化学科学理论的人才。

现代化工教育的发展

由于化工技术水平不断提高，化工教育也相应地发展起来。1887年英国曼彻斯特工业大学首先开设化学工程课程，从此出现了一门研究化工技术规律的新学科。1888年美国麻省理工学院开始设立化学工程系。我国的化工教育也是开始于清朝末年。光绪二十九年（1903年）清政府的“学堂章程”规定，在格致科大学里设“化学门”，除讲授基础化学科目外，还开设应用化学课程。同时还规定工科大学里设“应用化学门”。所谓应用化学，有广义和狭义的两种含义。从广义角度来讲，应用化学是研究化学材料的生产原理、生产技术和应用方法的化学，包括工业化学、农业化学、药物化学等等。而狭义的应用化学仅指工业化学而言，就是研究综合利用天然材料和合成的半成品加工成生产资料和生活资料的化学生产过程的一门科学。它是一门在化学、物理等科学成就的基础上，寻求技术上先进和经济上合理的生产方法、原理、流程和设备的学科。根据1917年（民国六年）教育部公布的第六十四号大学令中提出，应用化学门可以设置：无机化学、有机化学、物理化学、电气化学、矿物化学及矿物识别、冶金术、试金术、应用化学、火药学大意、化学分析及实验、应用力学、水力学、机械学、计画与制图、工业经济学、应用化学试验等二十多门课程。这些课程涉及的领域很广，包括了化学、机械、电工、建筑、经济五类科目。所以，也可以概括地说应用化学是化学加工工程的混合体系。

我国最早设立化工系的是浙江大学。浙大于1927年8月将浙江甲种工业专门学校改组为该校的工学院，于1928年正式成立化工系。从此，各大学陆续设立化工系。到全国解放前夕（据1948年统计），我国设有化工系的大学有：金陵大学、中山大学、中央大学、南开大学、四川大学、东北大学、湖南大学、清华大学、北洋大学、广西大学、中正大学、大同大学、江南大学、东吴大学、长春大学、台湾大学等二十所。新中国成立以后，接收了原有的旧大学，经过1949年至1956年的院系调整，又适应国民经济发展的需要，增加了若干所化工院系。据教育部1981年5月统计，全国高等学校共有11个科目，694个专业。其中有工科专业357个，在工科专业中化工类有36个专业。到目前为止，全国设有化工系约30个，化工学院十所（北京化工学院、河北化工学院、沈阳化工学院、吉林化工学院、华东化工学院、南京化工学院、江苏化工学院、青岛化工学院、武汉化工学院、四川化工学院）。在化工院系里设有各种专业，如：化学工程、无机化学工程、基本有机化学工程、化工环境保护、无机化工、高分子化工、煤化工、化工腐蚀与保护、化工分析、化工机械、化学物理、核化学工程、化工自动化及仪表等等。各专业开设的课程均有二十多门。

多年来，我国的化工院系和化学系已培养出一大批化学化工人才，成为研究化学科学和开发化学工业的骨干力量。

从上面对化学化工教育的历史发展的论述，可以看到，化学化工教育是伴随着科技教育的产生而产生，伴随着化学科学和化学工业的发展而发展的。

李志安

2.我国化学化工教育的状况

加速化学科学和化工技术的持续发展，不仅是化学工业现代化的需要，而且也是整个四化建设得以实现的需要。如何加速化学科学和化工技术的发展呢？最根本的就是要加快化学化工教育发展的速度。我们要实现现代化，关键是科学技术要能上去。发展科学技术，不抓教育不行。所以，运用辩证唯物主义和历史唯物主义的观点，分析我国化学化工教育的状况，研究化学化工教育的一些基本问题，是至关重要的。

我国化学化工教育虽然有了一定发展，但由于我国化学化工教育的历史比较短，目前培养的化学化工人才，仅从数量上讲，还满足不了现代化工生产发展的需要。据1981年统计，我国高校在校生有114万人，与全国人口之比为13:10000，其中属于化学化工专业的就更少了。“文革”前，高等院校化工类专业的学生占全国高校学生总数的3.4%，据1979年统计其相对比值为2.3%。在化学工业中，化工技术人员占职工总数的比例也有类似情况。获诺贝尔奖金的有许多是美国人，这也绝非偶然。美国在校大学生与全国人口之比是世界上最高的，其比值为520：10000（瑞典为208:10000，非洲为26:10000，全世界范围是102:10000），美国现有四千所高等院校，将近1200万学生。

量变是质变的准备，没有一定的量变，不可能发生质的变化。要实现四个现代化，必须发展教育；要发展我们的化学化工事业，加速化学工业现代化，必须大力发展化学化工教育。下面着重探讨我国化学化工的学校教育中，有关教学论的一些问题。

教学论问题，一般包括教学论的理论基础、教学过程（包括教师的教与学生的学两个方面）、教学原则（在教学中必须遵循的基本要求）、教学计划、教学组织、教学方法和教学手段等方面的问题。

教 学 论 概 述

纵观世界教育史，在教学论方面，一般可以概括为两种思想派别：古典的理性主义和近代的形式教育派比较偏重智力训练，轻视实际知识，而古典经验主义和近代实质教育派则比较注意实际知识，轻视智力训练。

二十世纪三十年代初，出现要素主义教育思想，这是当代影响较大的流派。要素主义强调人类文化遗产的共同的要素，本质上就是强调理论知识的重要性。提出“文化的共同要素”为课程的核心。反对“从做中学”的“活动课程”、“设计教学法”等。强调以学科为中心和学习的系统性。认为应恢复各门学科在教育过程中的地位。严格按照逻辑系统编写教材。要素主义在普及教育的基础上进一步发现了学生智力发展的实际不平衡性，提出“天才教育”，“因材施教”的原则，并认为应以教师为“整个教育体系的中心”。

二十世纪四十年代以来，科学技术取得了长足的发展。科学知识迅猛增长，个体知识陈旧率越来越高，科学技术日趋综合化，科研的规模不断扩大，科学分类与科研体系日趋完善，科学的社会功能、社会地位以及社会后果日益增强，不仅科学日益社会化，而且社会的发展也趋向科学化。在这场空前规模的科学技术革命中，世界性的教育革命风起云涌。其中有两个人物最有代表性，这就是美国的布鲁纳和苏联的赞可夫。这两人基本观点相似，重视人的智力发展，反对死记硬背，主张启发学生学习的内部动力，重

视掌握学习过程，要求学生学会思考；适应当代的“知识爆炸”，强调教学内容、教学方法的现代化。目前，在苏联现代教育学派赞可夫等人对凯洛夫等传统教育学派的批评中，其主要一点是认为他们把学生掌握知识和发展智力看成是自然的统一，实际上他们重视的是知识、技能的掌握，而没有把发展学生的智力放在应有的地位上。我国解放以后，全面向苏学习，特别在普通教育中执行凯洛夫《教育学》中提出的教学原则的要求。在1953—1954年，全部照搬苏式教学法，偏重于知识传授，学生负担过重，能力低，知识面窄。近年来也强调发展学生的能力，但缺乏有效的措施，加上传统习惯势力比较稳固，变革不易。

教学过程中各种矛盾的辩证统一

目前，就我国化学化工院系的大学生来看，高分低能的现象还是比较严重的，低分低能也不乏其人。这与中学的（化学）教育也有直接的关系。现在中学教育中，多数学校仍是单纯灌输知识，片面追求升学率，搞“题海”战术，“疲劳战”，“以题代教”，对学生能力的培养不够重视。在教学中，有的把希望寄托在总复习课上，平时拚命赶进度，不管学生懂不懂，讲授很不得法。另外，学习不得法更是为数众多。对学生的学习主动性调动不够，仍处于“你讲我听”，“你做我看”的状况。不少学生上化学课，不会观察，不会归纳，不会推论，存在着“能力落后于知识”，“能力与知识之间关系失调”等现象。

辩证唯物主义认为，一切事物都是矛盾的。在教学过程中也存在着多种矛盾。掌握知识与形成技能技巧是教学中的主要矛盾；在这个主要矛盾的前提下，又有掌握“双基”与发展智力的矛盾。前面我们论述过凯洛夫是强调基础、强调规范的；而赞可夫和布鲁纳是强调能力的。我们认为二者不可绝对化。一般的说，知识与技能的矛盾，知识是矛盾的主要方面，因为技能是在掌握知识的基础上形成的；掌握“双基”与发展智力的矛盾，掌握“双基”是矛盾的主要方面，因为智力的发展是离不开知识和技能的掌握的。反之，智力的发展又能促进知识技能的掌握。“双基”与“能力”的发展是辩证统一的关系，学习质量是二者的有机结合。

我们应提倡，以抓“双基”和提高能力为中心，组织教学工作；应在教法上体现“双基”和能力的和谐配合。根据这一原则，可开展“单元结构教学法”的教改试验。这种教学方法的主要精神是根据知识的内在联系和规律把内容分成若干“块”，每“块”里有主线，有知识的延伸，“块”与“块”之间也有主线联络，教学是按“块”的结构编成单元进行，而不是按“节”进行。例如，讲有机化学，不是按烷、烯、炔、卤代烃、醇、醛、酸、酯一个一个地讲，而是立足它们的关系贯穿起来讲。在讲授中穿插有机化学发展史的故事。其主线是：胺$\xleftarrow{\text{还原}}$硝基化合物$\xleftarrow{\text{硝化}}$烃$\xrightleftharpoons{\text{卤代}}$卤代烃$\xrightleftharpoons[+HX]{\text{水解}}$醇$\xrightleftharpoons[\text{还原}]{\text{氧化}}$醛$\xrightleftharpoons[\text{还原}]{\text{氧化}}$酸$\xrightleftharpoons[\text{水解}]{\text{酯化}}$酯。从此主线再引出若干分枝，各向延伸。这样，一类一类有对比，有互变，关系清楚，来龙去脉清晰。这样，学生学得快，记得住，会推导，而不是片面地、孤立地死记硬背。学生不但能很快写出了制法性质，而且还设计出一系列联贯的实验。不但“双基”得到了巩固，而且也形成了能力。

此外，在讲课中穿插有机化学发展史，采取史论结合方式进行化学教学也是非常必要的。化学史是化学科学的形成和发展及其演变规律的反映。实际上化学史也是一部化学研究方法的历史。化学学科的研究对象是组成自然界的实体物质，它本身充满着唯物

辩证法。（1）结合化学史进行教学，不仅可以学到作为认识活动结果的结论，而且可以学到反映在认识活动过程中的研究方法，学到运用和发展知识的方法。比如：讲到原子分子学说，就可以结合它的确立过程，学习其中的科学抽象的方法。（2）结合教学内容补充一些化学史知识，对于学生树立辩证唯物主义世界观也是大有益处的。例如：讲化学元素的时候，扼要地介绍元素概念的形成，从中概括出世界的物质性；讲氧化还原的时候，简单交代一下由“燃素说”到“氧化说”的演变，阐述人类对燃烧现象认识的辩证过程；讲有机化学中的尿素的时候，联系1828年维勒人工合成尿素填平了无机物与有机物的鸿沟，说明自然界的统一性等等。（3）在“知识爆炸”的时代，化学这门古老的科学正面临着高度分化又高度综合的新的发展趋势；学科分支如异军突起，边缘科学应运而生，传统的研究方法推陈出新。在这种情况下，粗知一些本门学科发展的史实就显得更为重要了。

教材建设问题

教材既是教学经验的总结，又是科学的著作，教材建设是办好学校、办好科技教育的一项重要的基本建设。

教材工作要按照教学工作的“正常工艺流程”来进行。在正常情况下，应该先制订学制、专业、教学计划、教学大纲，然后再编教材。但，1961年和1978年两次编教材，都是在教学计划、教学大纲尚未完全修订的情况下进行的，因而所编教材还存在较大的问题。据中学教师反映，现用的统编十年制中学化学教材，绝大部分内容是直叙现成的知识和结论，采取灌输的方式，很少去引导思考；教材中采用逻辑方法较少；实验安排较多，但缺少指导观察；描述多而分析少。总的感觉，新教材对学生的能力发展重视不够。作为高等化工院系的教材，近年来通过联合搞统编教材，质量有所提高，但也存在不少值得商榷的问题。如有的化工教材为了讲求先进性，收编了一些新的理论和技术成果，但缺乏加工制作，不能深入浅出，各章节的难易程度也不够协调，甚至有的教材一开始就是啃硬骨头。一些专业课和专业基础课教材，还缺乏系统性和规范性，比如一些常用的计量单位、常用公式中的符号含义等在几种书中都不一致，使得教师备课和学生学习都有困难。现在高等化工院系用的教材有一百多种，可是在绪论和有关章节中谈一点学科发展史的却不多。从化工院校所包括的学科来看，它们的叙述方法和研究方法虽有联系，但也往往有所不同。只有系统的理论教学还不能使学生完全了解探索科学规律的途径。如果各学科教材都能在适当章节中运用逻辑过程和历史过程统一的方法谈一点学科发展史，那么，对缩短学生的认识过程，提高学生的智力，培养创造力都是有益的。教材是培养人才和传授知识的重要工具，应该有计划地进行教材建设工作，逐步为各门课程编写、出版各种具有不同风格和特色、反映国内外科学技术先进水平的教材。

教学计划与教学内容研究

教学计划体现国家对各专业人才培养工作中，教学和教育两方面的统一要求，是学校具体组织教学和教育工作的重要依据。随着化学化工科学技术信息量的增加，为了提高学习质量，增开新课或补充学习内容是必要的。可是，现在的教学计划中，仅化工院校的授课时数来看，已基本达到饱和状态。若是单纯增加学时数，学生的负担就会过

重，这不符合提高教育效益的原则。从目前开设的课程内容看，有些课程的经典内容还有不断精练的必要。在加强大学和中学之间的联系，加强“基础理论课——专业基础课——专业课”之间的联系方面，还可压缩一部分重复性的内容。象普通化学的内容，在中学基本都讲过了，在大学里就没有占很多学时的必要了。现在有些高等院校已取消了普通化学课。在化工院校中，象物理化学、化工原理等这些承前启后的课程，与基础课和各专业课之间存在着不少重复的地方，经过协调可以压缩一部分内容。另外，有些课程的内容叙述性和实践性特别强，这样的课程也不宜占更多的学时，可以采用“引读”方法并结合实践教授这样的课程。这样，可以挤出时间开设一些综合性课程和有利于提高学生的创造能力的课程，如科学技术发展史、自然辩证法、逻辑学、管理学等等。

实验教学状况

科学实验是近代自然科学用来征服敌手（宗教神学）和壮大自己的有力武器。在十九世纪以前，实验室实验绝大多数是为了搞科研，很少应用于教育。把实验方法引入化学教育，首先是从大学开始的。最早是1824年德国著名化学家李比希在吉森（Giessen）大学开设化学实验课。随着科学技术的发展，实验教学在高等学校里越来越处于显著地位。进入二十世纪，特别是第二次世界大战以来，为造就大批科学和工程技术人才，世界各国高等学校都强化实验教学。

我国近代化学史上，徐寿进行“课堂示教”实验，可以算是我国实验教学的雏型。目前，就我国化学化工实验教学来看，与世界上一些发达的国家相比还有差距。1982年初，教育部曾组织过有关教学质量的调查分析，发现七七、七八两届学生的质量是比较好的，在智育方面总的来说不低于“文革”前五年制毕业生水平，基础理论略高于“文革”前的毕业生，但实验技能和动手能力较低些。从外国专家学者对我出国研究生的反映来看，普遍认为这两届学生总的基础理论不比国外一流学校低，但实验动手能力方面一般不如国外学生。我国建国以后化学化工实验教学和实验室建设取得了一定的成绩，但“文革”期间，“以干代学”，实验教学名存实亡了。有的高校由于搬迁，实验设备也受到了很大损失。1979年以来，经过整顿有所好转，但就目前来看仍然存在很多问题。各院校的实验仪器设备比较陈旧，数量也少，实验室面积不够，大多数学校未能按部颁教学计划开足实验课。多数学校实验课学时少，少数学校的一些实验课学时只有部颁计划的三分之一或一半。有些学校实验室技术力量薄弱，实验室管理水平低，对实验教学环节重视不够。有些教师也不安心实验室工作，实验课要求不严。现在有些实验课，仍然是多数学生只能在规定的实验步骤下，记录相应的现象和数据，作出对书本理论的验证。有些实验步骤是教师先做完了，学生只是看一看结果，学生做完实验，也是只知其一，不知其二。显然，这是很不够的。要进一步提高化学化工教育质量，加强实验教学和搞好实验室建设是非常重要的一环。

通过上面对我国化学化工学校教育状况的初步分析，我们可看到，我国化学化工教育还是存在很多问题的。现在，世界新的技术革命对人们的知识和能力提出了更新更高的要求，迫使人们要以更强的思维能力去从事创造性的劳动。这对教育质量提出了更高的要求，而要适应这一需要，我们的化学化工教育必须改革。

李志安

3.关于我国的理论化学教育

如何科学地认识理论化学教育的地位和作用，怎样正确处理好理论化学教育与实验化学教育，以及理论化学教育与量子化学教育的关系？这是目前我国理论化学教育中面临的一个重要问题。

科学地考察理论化学的形成和现状

为了科学地认识理论化学教育的地位和作用，有必要先从历史的角度考察一下：什么是理论化学以及它的形成与发展状况。

（1）理论化学的“四大力学”

在国内外的许多文献中，常常把物理化学叫做理论化学，以表明物理化学的原理和方法是化学和化学工业的理论基础。例如，化学热力学是化工热力学的基础，化学动力学是化工动力学的基础。相对于具体结合化工过程而侧重生产实践的化工热力学和化工动力学来说，化学热力学和化学动力学自然是一般理论性的。

量子化学产生之后，人们常把它作为理论化学的基础来看待。从这里自然派生出一个不可回避的问题：量子化学与物理化学的关系如何？目前，有人把量子化学归于物理化学范畴；有人则把它纳入化学物理学领域。物理化学与化学物理又有什么不同呢？

在量子化学之前产生的化学热力学和化学动力学是经典物理向化学领域渗透的结果，因此可以叫做传统的物理化学。传统的物理化学当然也包括电化学、溶液理论及物质结构的内容。然而原子和分子的微观结构是被现代物理学所揭示的。原子体系的电子壳层结构（化学元素周期律的物理本质），原子的化学键（化学行为）以及分子之间结合力的量子力学的本质，分子的结构及其性质，晶体的结构和性质等等，均是新物理学的重要分支，即原子物理学和量子力学向化学领域渗透的重大研究课题。在本世纪二十年代下半期和三十年代上半期，这些课题形成了化学物理学。原子物理学的确立和量子理论的发展不可分离。化学物理学作为化学和新物理学理论之间的一门边缘学科，无疑是在量子力学确立之后形成的。

为了区别经典物理学和现代物理学对于化学的关系，人们觉得有必要给新兴的物理学和化学之间的边缘学科起一个新的名称。苏联学者于1930年首先提出化学物理学这个新边缘学科概念。1931年，苏联成立了第一个化学物理学研究所；1933年美国创办了化学物理杂志。新兴的化学物理学一开始同经典的物理化学的区别是比较明显的。如果说经典的物理化学和经典物理学（特别是经典的分子物理学）密切相关，那么化学物理学则和新兴的现代物理学（特别是原子物理学和量子力学）不可分离。换句话说，传统的物理化学研究化学过程和分子物理过程的联系，化学物理则着重探求化学过程和原子物理过程的本质联系。传统物理化学主要是宏观的，而化学物理学则是微观化的。

从三十年代末开始，以量子化学为中心内容的化学物理学的理论方法向传统化学的各个分支积极渗透，同时也向作为传统边缘学科的物理化学的各个分支积极渗透。结果，物理化学本身也不断微观化和广义化，这样，这两门新、旧边缘学科之间的界限消融了。现在，人们所说的物理化学范畴是广义的，它包括化学物理学的内容，尽管化学物理学这一名称还保留着。因此，量子化学既是物理化学又是化学物理学。在表面上这

是不同的看法，实质上却没有什么分歧了。

由于计算机的不断更新换代，量子化学的复杂计算问题有了出路。在三十年代，对最简单的氢分子作量子化学的理论计算，用当时的台式计算机要花一年时间才能完成。现在运用最好的计算机，使许多非常复杂的、过去根本无法进行的理论计算成为现实。例如，对原子数多达十个的分子进行定量计算，其工作量是特别巨大的，起码要作多少亿个积分运算，但运用电子计算机只需几分钟即可完成。量子化学和计算机科学结合起来，产生了一门新的边缘学科，有人叫它是理论计算化学（或者称量子计算化学）。若把范围扩大一些，可简称计算化学，它构成理论化学的一个分支。这门新的边缘学科也突破了传统边缘学科的界限。计算机科学主要是技术科学，但今天的技术科学正在科学化，计算机技术就是科学化的技术科学；反过来说，今天的基础理论科学也正在技术化。计算化学之所以被列入理论化学的范围，显然是和量子化学的技术化有密切关系。在计算化学的帮助下，量子化学正在扩大自己的用武之地。理论计算化学实际上从属于量子化学，因此也可以把它视为物理和化学之间的边缘学科，而不能把它作为理论化学的一个独立分支学科来看待。

化学的统计力学根据分子结构以及分子之间的相互作用，运用统计物理学的理论和方法，研究物质聚集态的热力学和动力学性质。显然，这既是化学物理又是物理化学，如果说由传统的物理化学过渡到化学物理学是从宏观到微观，那么通过化学统计力学又从微观导向宏观，为“材料设计”提供了理论根据。理论化学的这一发展具有重要的实用价值。化学统计力学不仅促进了溶液理论和相转变理论的发展，并且在高分子领域和生物化学中得到广泛运用。

根据以上对理论化学的形成历史和现状的简要分析，我们认为理论化学目前是由“四大力学”构成的，即化学热力学、化学动力学、量子化学（化学量子力学）和化学统计力学。

（2）量子化学在理论化学中的地位

应当承认，化学热力学、化学动力学和化学统计力学目前都离不开量子化学的物质结构理论。揭示分子的静态甚至动态结构（包括化学反应过程中的不稳态分子）；研究化学物质的性质和结构的关系；探索化学反应的规律性和内在机理，为理想的新材料进行理论设计等理论化学的课题。从原则上说都离不开量子化学的指导，起码可以说化学家们面对这些研究任务而作理论思考时离不开量子化学。因此可以说，量子化学在理论化学领域中处于中心或基础的地位。

不管化学的内容多么庞杂，其主要内容不外乎有两个方面：一是化学物质的结构，其中最要紧的是化学键问题；二是化学反应，其中最要紧的是化学活性问题。就此意义上来说，化学可以分为两大部分，即结构化学和反应化学，当然两者又是统一的，因为结构和反应性能密切相关。

从理论原则来说，量子化学可以解决结构化学和反应化学这两方面的问题。但是，理论原则上地解决并不等于具体地解决。特别是在化学反应机理问题上，量子化学遇到的实际困难很大。

不可轻视化学热力学和化学动力学的研究。特别值得注意的是现代微观化学反应动力学（又叫分子化学动力学，简称分子动力学）的实验研究，为理论化学展示了一个令

人乐观的前景。

在化学反应中，分子之间发生"碰撞"而进行反应的始末时间的数量级是10^{-13}秒。在激光时代之前，利用萤光物质的实验手段追综化学反应的时间只能达到10^{-9}秒。现在利用红外激光技术，时间分辨能力可达10^{-11}秒。有的科学家持乐观态度，认为1985年以后有希望达到10^{-14}—10^{-15}秒。由此看来，激光化学的未来发展，有可能使人们从时间上把握住化学变化的微观历程。从空间尺度上来看，利用激光进行"微区分析"，可以达到分子大小的数量级（10^{-8}—10^{-6}厘米），甚至能够检验到单个原子的行踪；运用X光照片，能够使人们看到晶体结构中的原子空间排布情况，1973年以后发展起来的激光动态光谱学，可以展示出某些分子的空间取向、电荷转移、能量转递、化学键的破坏和形成等细节情形；新兴的激光催化化学的出现，可使人们通过激光照射而导致某些化学键共振（使分子活化），并且可以断定某些受激分子的化学键激活的部位；人们使用短脉冲激光，还可以研究不稳定的过渡态分子，等等。总起来说，从时间和空间上综合衡量，这些微观化的新动向具有非常重要的意义。它有可能使人类自由控制或者改变化学反应的中心。随着新的物理技术和方法的不断出现，可望在研究化学反应的实验手段上，还会有新的突破。

总之，理论化学的"四大力学"现在都是理论化学的重要发展方向。边缘学科之间的"杂交优势"，例如生物化学作为生物学和化学之间的边缘学科，也将是促进理论化学发展的重要途径。

应当指出，如果考虑到物理化学（广义的物理化学范畴包括了物理学和化学之间的所有边缘学科）和生物量子化学的发展趋向，把量子化学作为理论化学发展的最主要方向来评价也未尝不可。即使如此，量子化学也不是理论化学发展的唯一方向，因为量子计算化学在短时期内还根本不可能把常规实验化学降低成为被动的从属验证的角色。

正确处理理论化学教育和实验化学教育

不仅在我国，就是在科学和生产都先进的国家，量子化学在工农业生产中的地位和作用都远不如在理论化学中的地位和作用。工农业生产主要要求化学提供材料，这是合成化学的任务。

合成化学是传统的实验室式的经验科学。新的化合物、新的合成材料是"经验选择"出来的。在量子化学和计算化学相结合的基础上，理论化学家们提出了"分子设计"的理论目标，甚至有人展望了"无试剂化学"的理想境界。把量子计算化学比作"化学实验"，同常规化学实验相比较，它使用的不是化学试剂，而是各种参数，把这些数据按理论程序输入计算机而得到"实验结果"，这就是所谓"无试剂化学"的思想。对此，国内外科学界（特别是物理界和化学界）有激烈的争论，至今还在继续。许多化学家反对"无试剂化学"这一说法，认为该名称本身就是否定化学。我们认为，强调理论作用的"分子设计"这个提法，作为科学预测的目标还是可取的。当然，今天理论化学距离"分子工程学"的目标还相差甚远。"无试剂化学"这个提法本来也是强调理论作用的，但很容易令人误解。若是利用这个理想名称来贬低实验化学甚至取消化学，不仅是不对，而且会带来不良的后果。

有人认为，利用量子计算化学方法可以跟踪化学反应过程，根据是它可以提供反应

过程中间产物的结构和性质。

现在，从信息论的角度来说，量子计算化学是可以提供有关分子的静态甚至动态结构、化学反应活性以及化学反应途径等方面的理论信息，这就是进行的所谓理论预测。特别重要的是，理论计算化学可以提供目前人们还不能在实验室里获得的理论信息。例如，还不能用现有实验手段得到那些“短寿命”并且稀少的中间产物的信息，而这类信息的研究对于探求催化反应的微观机理是至关重要的。我们充分肯定这一点。但是，现有材料还远不能表明量子计算化学能够跟踪化学键的形成和破裂的快速过程。究竟是在理论计算上，还是在实验手段上先解决化学变化的微观历程问题呢？有待进一步实践而提供判断的材料。

应当承认，量子化学在整个化学领域中的运用还不算多，特别是解决的现实的化学反应问题而成功的事例更少。利用量子化学的理论模型预计分子的性质、结构等，还存在很多困难，人们对量子计算化学的近似处理结果，在不少情况下还不能充分信赖。面对这种情况，当前我们要把理论设计和实验研究结合起来进行合成材料的工作，不能偏废一方。理论计算要靠常规实验验证，后者还远远没有处于只是为了验证理论计算结果的从属地位，它将继续发挥探索道路和突破关键问题的作用。我们认为，提高理论计算的预测效果，也不能很快降低常规实验的作用。例如，考虑电子的相关作用甚至相对论效应，以弥补分子轨道理论的缺欠，并不意味着化学的“分子设计”的时代很快就会到来。

化学统计力学和化学仿生学结合起来，将会在寻找新材料方面出许多成果。我国化学界普遍承认，我们在这方面的力量还相当薄弱，急需迎头赶上。

我们认为，正视上述实际情况，不难对我国化学教育问题作一合理地思考。不论大学、中专，还是普通中学，毕业生的出路是绝大多数人将直接从事工农业生产。因此，化学教育还是以常规实验化学为主的好。不要小看普通的试管和烧杯，现在还不能丢掉“瓶瓶罐罐”。农民需要科学种田，普通的实验化学在农业科学中占有重要地位，农民希望他们的子弟懂得并能动手掌握普通化学知识（肥料，农药，土壤改良等），这是急需大量普及的事情。我国的化学工业战线，不论大厂还是小厂，所需要的是那些“能动手的”技术人员。

当然，从长远的战略眼光来看，我们也急需要培养一批具有高度理论水平的科学研究人材，他们肩负着提高的任务。量子化学无疑是重要的，然而这不是理论教育的唯一方向，我们要全面安排理论化学的课程。化学热力学、化学动力学和化学统计力学都是实验技术性比较强的理论课程，因此在进行理论教育的同时应注意加强实验和技能的训练。即便是在进行理论性强的量子化学教育时，我们也切记不忘实验化学。那种认为化学本身（特别是实验化学）没有什么理论可言的看法是不正确的，特别是在科学技术化和技术科学化的今天，我们更不应该轻视实验化学的地位和作用。

解　强　郭保章

（二）化学人才的培养与开发

1. 培养化学人才的理论问题

时 代 要 求 与 人 才 标 志

科学技术现代化是实现四个现代化的关键，目前我国化工领域的专门科研人才太少，使化工技术水平难以迅速提高。许多化工企业的生产技术和经营管理落后，大批职工缺乏必要的科学知识和操作技能，熟练工人和科学技术人员严重不足。因此，今后在进行经济体制改革的过程中，进一步普及化学化工教育，培养各级专业人才，已成为一项急迫的任务。

科学人才的主要标志是什么？虽然其说不一，但比较共同的认识是，必须具有创造性劳动的能力。也就是说，“创造能力”是科技人才的基本特征。

一个具有“创造能力”的化学化工人才，首先必须掌握渊博的科学知识，并且具备运用这些科学知识去解决实际问题的能力；同时，必须会使用各种科学仪器、设备进行科学实验，并运用实验手段去研究问题的能力，他们还必须了解和掌握科学研究的一般规律，并用以指导工作，……等等。这样的人才应当是有理想、有志向、有强烈的事业心，有正确的人生观和哲学素养，勤奋好学、埋头苦干，有顽强的毅力，能克服学习和工作中的种种困难，不断进取，勇于探索富有创造精神。

为了培养这种新型化学化工人才，从理论上深入研究当前在人才培养方面，特别是学校教育中存在和不断出现的种种问题，注意处理好化学化工人才培养中的各种关系，是至为重要的。

化学化工人才培养中的一些哲学问题

在培养化学化工人才的过程中，存在着各种各样的问题。其中有不少哲学问题，值得我们去思考。正确地解决这些问题，不仅具有深刻的理论意义，而且有其重要的实践意义。

（1）理论与实践。理论与实践的关系是马克思主义认识论中的一个根本问题。应当说，它是人们所熟知的。然而，在化学化工人才培养中，往往反映出对这个问题解决得并不理想。

首先，表现在基础理论教学与实验教学的关系。毫无疑问，各类学校在化学化工专业教育中，应当把基础理论教学做为学生掌握专业知识的基础，这个基础越坚实越好。但是，要让学生真正深入理解、掌握这些基础理论（科学概念、定理、定律、规则以及它们的应用等），还必须配合必要的实验教学。因为，化学本身就是一门以实验为基础，经验性较强的学科。实验在化学化工发展中起着异常重要的作用。从1901年至1979年，共颁发过71次诺贝尔化学奖，其中有53次颁发给了实验项目的成果，约占总颁发次数的74.6%。若按个人计算，因从事实验而获诺贝尔化学奖的共71人，约占获化学奖总人数（93人）的76.3%。由此足见实验在化学化工发展中的特殊地位。实践证明，离开了实验，学生不能亲身观察到大量生动的化学现象，从而也就不容易理解反映这些现象的本

质的基本理论。同时，实验教学正是培养化学化工人才具备实际的研究能力和工作能力（尤其是动手能力）的重要手段。此外，通过实验教学还可以逐步培养学生具有良好的科学态度。因此，理论教学与实验教学，应当是一种相辅相成的辩证关系。它是理论与实践关系在化学教育中的具体体现。然而，以往的教育实践表明，有不少的学生，甚至一些教师对实验教学的重要性缺乏正确的认识。当然，这往往也与各级教育领导部门的认识水平和重视与否分不开，诸如在一些具体制度、规定方面存在不够合理的现象。从而造成了化学教育中各种各样重理论轻实验的倾向。

其次，表现在课堂教学与生产实践的关系上。深入生产实际，从实际生产过程中学习知识，这不仅对化工专业的学生重要，而且对一般化学人才，甚至对将来从事理论化学工作的人才，也同样十分必要。关于这一点，在化学史上许多著名的化学家都有切身的体验。例如，世界上第一个诺贝尔化学奖获得者——范霍夫，在青年时代，他为了立志献身化学事业，就曾进入糖厂，深入了解和验证他在大学里学到的化学知识。结果他发现书本上的理论与实际生产中遇到的情况，往往有很大出入。这使他进一步坚定了通过实践进行学习、科研的决心和信心。

化工生产是化学理论向应用的转化。很显然，深入生产实践，对理论教育会发挥巨大的影响。这是理论与实践关系的另一重要体现。这一方面，在我国过去三十多年的实践中，不时地也曾强调过，但也走过一些弯路。比如十年动乱中，以所谓“典型任务带教学”，“典型产品带教学”。实际上不是“带动”教学而是代替教学，以至造成理论被荒废、丢弃，出现以干代学的不正常现象。这种极左的做法，歪曲了马克思主义关于理论联系实际的原则。这也给人们造成种种误解，直到目前，许多同志还不敢强调深入生产实践的重要性。

第三，在师范院校培养师资中所安排的教育实习，也是理论与实践关系的一种表现。我们培养从事化学化工教育的师资，是化学化工人才的重要组成部分。为此，就应当注意培养学生进行教学的实际能力。一个颇有造诣的科学家，如果去给学生（特别是中学生）讲课，其效果往往不一定很理想。其中一个重要原因就是他缺乏从事教学工作的实际能力或经验。所以，在培养化学化工师资的过程中，应该让学生深入教学第一线去实际体验和学习，这就是教育实习。师范院校的师生，都应自觉地认识教育实习的重要意义，而不要仅仅是“不得已而为之”。当我们强调理论联系实际的时候，不应无视这一稍具特殊性的问题。

（2）知识的深度与广度。现代化学发展神速，出现了知识激增和知识新陈代谢加快的形势。据一些专家的预测：未来的二十一世纪将是化学的世纪，这说明人类对自然界化学运动的认识日益深入。同时，由于现代自然科学日趋高度分化的特点，使得化学知识也越来越专，化学化工的分支学科越来越多。据统计，目前全世界每年发表的化学文献，就够一个每天阅读八小时的化学工作者整整读48年。一个人即使终生阅读文献，也只能读完本专业文献的5％。因此，今后我们在培养化学人才方面，首先必须注意知识的专、深和新。现代自然科学的另一个特点又是越来越高度综合，它反映了现代化学与其它学科的相互渗透也与日俱增。这一特点又要求我们培养人才时，必须注意到知识的广度。一个人只了解狭窄范围内的有限材料，是难于掌握现代化学的最新发展动态的，从而也不易抓住一些意义重大的课题进行研究，更难预见到本学科新的生长

点。

因此，在现代化学化工的发展中，知识的深度与广度，即专与博这一对矛盾就显得更为突出。如果我们能自觉地认识这一对矛盾，并且在培养化学化工人才中处理好两方面的关系，就会达到快出人才、多出人才的目的。过去与现在，我们在这方面还存在着较大差距。根据一些化学家带研究生的体会，认为以往所培养的化学化工专业大学生，知识面过窄是个比较普遍的缺陷。学校教学中，也经常遇到学生和研究生因为缺乏本专业以外的一般常识，而直接影响学习某些较深的专业理论问题的现象。造成思想不活跃，死记硬背，学习呆板。这种现象如不及早注意，认真克服，势将影响培养出合格的化学化工人才。

在培养化学化工人才当中，知识的深度与广度相统一的观点，不仅应当体现在专业课程的设置上，如在保证基础课的前提下，适当多开些有关的选修课；而且每门课程的教学中，其内容的选择等问题上，同样应该自觉贯彻这一原则。

（8）专业知识与哲学素养。严格地说，这也算是知识的深度与广度的关系问题，但又有其特点。一般学生（包括中学生、大学生和研究生）对哲学的兴趣比起对一般自然科学知识来就更加缺乏。原因是多方面的，但不了解自然科学与哲学的关系，却是一个共同原因。

现代化学的发展，正由经典的以定性描述和经验性为主要特点，逐步让位于现代定量化的理论科学。在这一过程中，化学学科本身提出了愈来愈多的哲学问题。诸如组成、结构与性能的关系；化学反应中宏观与微观的关系；静态与动态、部分与整体、量变与质变、平衡与不平衡、吸引与排斥等。要使学生正确理解和掌握现代化学这些丰富的理论知识，就必须注意培养他们学会辩证地思考问题，不断提高他们的辩证思维能力，尤其是创造性思维的能力。这就要求我们在培养化学化工人才中，加强对学生进行辩证唯物主义教育，而且要把这种教育与专业知识的教育有机地结合起来。在当前，开展自然辩证法及科学方法论教学就是一项重要措施。近年来，由于各级领导的重视，中央教育部还专门颁发了文件，规定在理工科研究生中把自然辩证法列为必修课，而且大力提倡在本科生中开设选修或必修课。目前在全国范围内，自然辩证法的教学和师资培养都有了较大发展，取得了一些可喜的成绩。1982年7月，教育部和中国自然辩证法研究会召开了全国高校自然辩证法教学讨论会，交流了经验，研究制定了不同类型学校的自然辩证法教学大纲。今后，继续加强这项工作，对于化学化工人才的培养与开发，将是一项具有战略意义的措施。

（4）了解化学化工的历史和最新前沿。一个合格的化学化工人才，要深刻理解与掌握已有的理论知识及实践经验，还必须使他们懂得一点化学化工的发展史，以便弄清所学知识的来龙去脉；同时，面对着当今知识激增和知识新陈代谢周期不断缩短的现代科学发展趋势，更应重视启发学生自觉地关心国内外在本学科及相关学科方面的新进展，以防止知识新陈代谢延滞造成人的思想僵化，延长人才的科学青春。达到此目的的一个有效措施，就是适当地开设一些化学史、化工史或化学化工思想史的课程。近几年来，随着自然辩证法及科学方法论教学的深入，已在不少院校开设了各学科发展史和科学技术史专题讲座、选修课或必修课，学生普遍反映较好。有的地方还开展了有关未来学、科学学方面的教育。毫无疑问，从长远来看，这些所谓“软科学”，在人才开

发中必定会越来越显示出其重要作用。

（5）传授知识与培养能力。学校是传授知识的场所，古今中外，这被看作无可怀疑的信条。似乎只要所培养的对象掌握知识多，就算是合格的人才。其实，如果了解一点历史上著名的化学化工专家的生平及科学历程，就会对上述“信条”提出质疑。从波义耳到拉瓦锡，从道尔顿、法拉第、门捷列夫、范霍夫、居里夫人，直到当今著名的现代化学家们，他们都是卓越的化学人才，都有渊博的知识，理论方面造诣很深。但是，使他们成才的更重要因素，乃在于他们都有较强的创造能力。著名科学家爱因斯坦曾指出过，发展独立思考和独立判断的一般能力，应当始终放在首位，而不应当把获得专业知识放在首位。可见，在培养化学化工人才中，必须处理好传授知识与培养能力的辩证关系。

要使学生能够运用所学的知识去解决复杂的实际问题，使他们在学习中对学到的知识能举一反三，触类旁通，就必须注意培养他们分析问题、解决问题的能力。所谓能力，应包括诸如自学阅读能力，实验动手能力，理论思维能力（如思考和理解能力、分析矛盾发现问题的能力、归纳演绎能力、分析综合能力、运用数学等手段进行推导论证的能力）等等许多方面。有了这些能力，他们就会具备并不断提高自己的科学创造能力。

有了这种能力，就能使他们对付知识激增和知识代谢。事实说明，现代化学化工飞速发展，使得一个化学人才在学校所能学到的有关知识，至多只是他一生工作所需要知识的10%左右，其余占90%的绝大部分，只能在后来的工作实践中陆续学习。能力越强的人，将来学新东西也就越快，就越能永葆科学青春。

因此，在学校教育中，特别是化学化工专业，必须使学生在学好基本理论知识、打好基础的同时，要通过加强实验课教学、参加生产实践，亲身参与某些科研活动等环节，重视培养学生的基本技能和科学能力。

此外，为了培养学生的上述能力，开设科学方法论课程会有直接帮助。各门专业课教师在传授知识的过程中，也应该结合各章节内容，不断地给学生指出其中某些重要的研究方法，使他们在获得知识的同时学会方法，掌握技能技巧。这样做也可以使传授知识本身变得生动活泼。

显然，以上仅是化学化工人才培养中的一些理论性问题。其中道理很浅显，甚至是老生常谈，然而做起来并不容易。所以，要解决好这些问题，首先还须扎扎实实地做起来，在实践中不断摸索改进，方能逐步取得成效。

开创化学化工教育的新局面

要迅速发展我国的化学化工事业，急需培养大批合格的人才。为此，当前必须全力开创化学化工教育的新局面。这不仅需要充分认识教育的重要性，增加智力投资，积极贯彻落实党的知识分子政策，而且还必须认真、积极而稳步地抓好各方面的改革。

（1）注意培养多种化学化工人才，广开学路。当前，研究化学、从事化工生产的专门人才还很少。如果只靠正规的全日制大学培养，实难满足需要。1981年，我国在校大学生114万人，全国平均每一万人口中只有12人。而日本早在1978年就有在校大学生215万人，平均每一万人口中即有196人；同年在美国就有1130万人在大学学习，平均每一万人口中高达538人。可见，我国的大学生在校人数较少，其中属于化学化工专业的

就更少了，至多占全国人口的万分之一。直到1983年，全国高等化工院校的在校学生只有二万六千人，比“文革”前还少1500人。就是这少量的化学化工人才中，还有一部分人将从事理论研究和教学工作，只有一部分人学生今后将主要从事应用化学的研究和化工生产。这里面真正属于既从事基础理论研究又可以搞应用研究，或能直接去指导化工生产的人为数就更少了。这反映出我们在化学化工教育中，注意理论联系实际、重视培养能力不够。

今后，在继续培养大量从事化学基础理论和教学的人才外，还应该培养更多的既能从事基础理论研究和教学，又能搞应用研究或能直接指导化工生产的全面人才，这样的人才方能促进基础理论研究向生产力的转化，适应我国化学化工事业发展的要求。

要造就大量的全面人才，势必需要对目前的化学化工教育结构实行重大变革。单靠高等化学化工院校来培养是不可能的。在培养人才的途径上我们必须走得宽广一些。我们在这里所说的化学化工教育，指的是广义的化学教育。即除了全日制大学、中专、中学的化学教育外，更多的是指对在职职工和干部的业余化学化工教育。我们的国情是，经济上尚不富裕，文化上还处于落后地位，所以我们现有的职工、干部队伍文化水平不高。比如在1979年，全国有9945万职工，其中半数是在十年动乱中参加工作的，真正具有高中以上文化程度的只占全国职工总数的10%左右。而同期在全国1800万干部中，具有大学文化程度的不过18%，其中中高级工程技术人员只占2.4%。在工业部门，工程技术人员只占工业职工的2.8%，而同一时期美国则是17%，日本高达20—30%。面对这种现状，强调对在职职工的教育是十分必要的。这要求在加强高等化学化工的正规教育的同时，还要广开学路。可以通过各种各样的培训班、进修班以及夜大学、电视大学、职工业余大学等形式，对化工行业在职职工、干部进行专业教育和培训。由于种种原因，开展这方面的工作还是有不少困难以至阻力的。例如有些基层领导人，对职工教育的重要意义缺乏应有认识，不懂得提高职工文化技术水平是“磨刀和砍柴”的关系，不懂得即使是一个大学或研究生毕业的人也还要不断地进修和学习。美国有人统计，1965年的大学毕业生，五年后其知识陈旧45%，十年后陈旧70%；而1976年的大学毕业生，四年后就陈旧了50%，十年后将全部陈旧。知识代谢越来越快，使先进的工业技术也具有极大的不稳定性。不少发达国家现在都重视对在职人员进行“二次教育”、“终身教育”，让职工每隔几年就有一次为时半年以上的接受这种再教育的机会。据说，美国有80%的企业专门设有培训所，对职工进行培训；全国有30所大学专门设有进修机构。美国某公司负责人曾说过：“不久以前还认为，学者和工程师应当在业余时间学习。现在这种意见已经过时。现在我们对自己的人员说，你们要不停地学习，努力提高自己，学习就是你们工作的组成部分。”①我国在1981年已拥有县以上化工企业5400多个，职工总数有280多万人。如果把这些人的文化水平普遍提高一步，将能发挥出巨大的生产潜力，可收到显著的经济效益。

（2）化学教育中的普及与提高。在化学化工教育中，普及与提高，基础课与专业课之间同样是一种辩证关系。这一关系在过去三十多年的教育实践中一直有争论。有人强调基础，有人则强调提高。某一时期强调基础课教学，另一时期反过来强调提高，过

① 转引自彭文晋：《人才学概说》，哈尔滨工业大学出版社，1982年，95页。

分地强调多开选修课。总之，基础与提高的关系总未得到正确处理，目前仍是一个亟待解决的问题。

在专业课程设置中，还须注意到培养全面化学化工人才的实际需要。对于培养人才的实际能力的有关课程，诸如数学、外语、实验课，以及为提高人才思维能力的自然辩证法、科学方法论等课程，应当适当加强。认真考虑“通才”教育的需要。

（3）开展人才交流，克服“近亲繁殖”。过去几十年中所培养的大批化学化工人才，普遍存在的知识面过窄、学术思想不活跃的重要原因之一，也在于人才交流少，管理太死，使用不当。一些老化学家近几年不只一次指出，我们现在的化学人才培养使用中存在一个严重的问题，就是人们常说的“近亲繁殖”。一个学校的师资，一个研究机构的研究人员，多是留用的本校、本单位培养出来的学生。这种现象在一些老的、重点院校或研究单位尤为突出。从学术上来看，这种状况有着限制人才眼界，不利广泛了解外界动态，不便扩大知识面，学术思想局限等弊病。它影响着化学化工人才学术水平的进一步提高。

为了改变这种状况，最好的办法就是广泛开展化学人才交流。这样做可以把外部的学术思想、风格、学术观点等随时吸取进来，以活跃本单位的学术空气，有利于化学科学的发展。这可以说是用“远缘嫁接”克服“近亲繁殖”。

化学化工人才的不断交流，还有利于打破现行的“单位所有制”，改变人才积压，使用不当，如专业不对口，用非所学的状况。当前，我国的化学化工人才不是多，而是太少。在化工企业中科技人才只占职工总数的4.5%，比“文革”前的7%还少些。但是，浪费人才的情况也不少。师范学院化学系每年都有人回到工厂、企业或机关，从事一般干部工作而没做化学教师，改行的现象还很多。不开展人才交流，就很难改变这种现状。

提倡人才流动，还有利于调整人事关系，有利于解决各种矛盾，有效地挖掘现有化学化工人才的潜力，使人人都能各得其所，心情舒畅地全力献身化学化工事业，最大限度地发挥每个人的创造能力。

（4）实现干部队伍的“四化”是关键。化学化工人才开发和开创化学化工新局面，关键在于要实现化学化工干部队伍的革命化、年轻化、知识化和专业化。就我们这里所讨论的人才开发问题而言，尤其重要的是干部必须知识化、专业化，各级领导干部应当非常熟悉他所经管的化学化工业务，真正了解他领导的部门的科技工作者。同时也应当强调领导干部要不断地学习，不仅要知识化，而且能经常接受新东西，不致逐渐“退化”，才能保持干部的专业化。只有这样，才能提高领导水平，实现化学化工科技管理体制的最佳化，达到人才管理的最优化。

乔 世 德

2. 培养化学人才的方法问题

现代化学科学正处在一个日新月异的发展时代。在现代化学研究上，要想有所突破，取得出色成绩，除了能运用新的研究手段外，还要求化学工作者，必须具有广博的基础知识，并善于吸收相邻学科的新成就。尤其是青年化学工作者，不但应当了解化

学科学的发展状况和发展动向，而且还要牢固地掌握近代化学的基础理论。只有理论与实验紧密结合，相辅相成，才能推动化学科学的不断发展。为此，必须重视化学人才的培养。

知识激增对化学人才的培养提出了新的挑战

所谓“知识爆炸”系指知识的急剧增长，远远超过人们接受和消化的时间限度，而造成严重的社会后果。其内涵是人类创造的知识，主要是自然科学知识，在短时间内以极高的速度增长起来。（本书付印前，学术界对所谓“知识爆炸”、“知识老化”等提法已提出异议，认为不妥。本文以及本书其他文章均写于1984年以前，希望读者阅读时对这些提法侧重于从加快学习日益激增的新知识，多掌握新的科学信息等方面去理解。——编者）

据统计，本世纪以来，世界总产值每隔25年翻一番。知识增长率大体与产值平方成正比。科学知识还不是直接生产力，若向生产力转化还需要时间。受这一关系制约，相应的情况是，开拓、创造新知识的科研人员每15年翻一番，刊载他们论文的刊物总数10年到15年翻一番。有人曾综合计算过，全世界的知识总量每7至10年翻一番。以化学专业为例，美国《化学文摘》1976年以56种文字报道了来自136个国家的45万篇文献。假如一个通晓各国语言的化学家每周读40个小时，每小时读4篇的话，一年只能读8千余篇。即使这样，也要用56年才能读完这一年发表的化学文献。这就是有些人所说的“知识爆炸”。这种知识激增的现象，导致科技人员的知识陈旧率越来越高。第二次世界大战以前，一个大学毕业生在校学到的知识，基本上可以用一辈子。而现在一个大学毕业生，5年毕业后，在校所学的知识就已经陈旧了一半。再过8年就完全陈旧了。

这种知识新陈代谢的亢进，对知识所有者的威胁日益加重。国外有个统计：如以每5年为一统计阶段，以10年后的状况为考察结果，那么，可以得出如下的统计：

年代	10年后知识陈旧率
1945	41%
1950	40%
1955	53%
1960	59%
1965	68%

不难看出，知识“陈旧”的现象是越来越严重了。总的看，现在的知识陈旧率比四十年代加快一倍以上。

这种知识迅猛发展的形势，给以继承前人知识为主要任务的青年化学工作者带来了严重的困难。摆在他们面前的严峻事实，是如何解决有限生命和有限最佳年龄与知识激增之间的矛盾。一个明显的事实是，科学工作者开始进行独立研究的年龄不断提高。一般的说，知识激增使每个人的知识继承期延长了，而人的生物性方面的发展远不能同知识的发展速度相比。科学研究的最佳年龄区（25—45岁），会不会被“爆炸”了的知识所吞食？成才之路会不会被“知识爆炸”所轰毁？事物发展的规律证明这是不可能的。

科技文献和知识总量的飞跃，对化学人才的成长是一场尖锐的挑战。随着知识的激增，科研周期也不断缩短，而育人周期却不断延长。如发电机的发明到应用大约经过了

60年，激光的应用只用了两年。而从上学到取得博士学位，优良者则需要20年左右，再延长下去，势必把最宝贵的时间都耗费在学习知识上，错过了创造力最旺盛的时期，造成科技队伍（包括化学人才在内）年龄结构的老化。

1955年，我国设立了中国科学院学部委员会，把大批处于最佳年龄区的科学家吸收到这一学术权威机构。当时，学部委员190人，平均年龄在48岁左右，其中有相当大数量的科学家（36%）处于最佳年龄区。例如，当时年龄较大的物理化学家吴学周也只有53岁。这同当时苏联科学院的院士相比，的确是一支生机勃勃的队伍。但是，目前我国科学家队伍却严重老化。据1978年统计，我国物理学和化学助研以上的人，平均年龄在48岁左右，比美国同级科学家队伍平均年龄41岁大7岁；我国全部正副研究员平均年龄在58岁左右，科学家队伍的年龄谱峰值超过60岁。

知识激增，队伍老化，人才短缺的状况与四化建设的迫切要求是极不相称的。科学发展，经济起飞，人才是决定的因素。若要改变现状，开发人才，必须注意人才开发方法论的研究。

化学人才开发的科学方法

人才，是一个广泛的科学的概念，是一种客观存在的物质实体，其内涵应是德、才矛盾的对立与统一。人才开发，是一个人才方法论的研究问题。纵观化学发展史，从波义耳到门捷列夫，以及现代一些著名化学家，例如黄子卿、傅鹰、吴学周等，都曾受过良好的系统教育。在一个人的发展中，先天的遗传素质是个重要的自然条件，但能否成才，关键在于后天的环境和教育。因此，化学人才的开发，必须遵循人才成长的普遍规律，采取科学的方法方能奏效。

（1）强化学校教育，以便形成雄厚的人才基础

化学专业的高等院校，是培养化学人才的摇篮。教育的功能能否有效的发挥，是关系到人才基础和水平的重要因素。教育宗旨除向学生传授知识外，主要应培养学生自学和研究能力，使学生具有坚实的基础理论知识和宽广的专业适应性。但是，目前学校教育存在着许多弊端。如：专业设置比较死板，知识陈旧的约有一半左右；知识面窄，导致学生思想不活跃，养成死记硬背的陋习；不管是什么样智力类型的学生，都用一个尺度去施行教育，影响了一些学生的智力开发和才力的发展；学校教育只注意传授知识的功能，忽视实验技术操作的基本训练。有些学生动手能力较差，一些学生缺乏哲学素养、辩证思维能力，特别是创造性辩证思维能力不佳，难以理解和掌握近代化学的发展规律。缺乏解决科学发展中矛盾的能力；学校培养与社会需要相矛盾，致使一些学生毕业后改行。再加上多年来受“左”的干扰，学非所用、用非所长的现象甚为严重，造成人才的极大浪费。

解决这些矛盾是很复杂的，但也是有办法的。例如：

①开展人才预测。现在各高等学校招生，都是按国家计划进行的。这种计划是推估的客观计划，只考虑了一般需要，对国家科学发展的特殊需要往往考虑不周。开展人才预测，就是有计划的调查现有化学科技人才的情况，和未来每个五年计划国家对专业人才的需要，在此基础上综合分析进行人才预测。然后对需要量较小的专业、重复设置严重的专业进行调整，根据需要设置一些新的专业。

②加强计划，定向培养。为了调动社会各方面的力量进行智力投资。高等院校可逐渐采取定向培养，除按国家计划培养化学人才外，还可与用人单位签订办学合同等办法，扩大招生量，改善教学条件，满足国家对化学化工人才的某些特殊需要。

③窄化专业，筛选知识。加强基础课教学，是对付知识激增和知识陈旧的最好方法。随着科学的飞速发展，新知识如同雨后春笋，老知识好似浩瀚的大海，仅靠几年的在校时间，来接受这些知识，已成为一个尖锐的矛盾。因此，在向学生传授时，必须进行科学的筛选，既注意知识的深度和广度，又要注意知识的系统性和联系性，还要注意新颖。为学生驾驭知识的航船，开拓知识的视野打下良好的基础。

④健全学生知识结构，培养学生自学和研究能力。老师就象园丁一样用知识的雨露浇灌学生的心田。但更主要的是培养学生自我调整能力，激发开创性思维，启迪智慧的火花。也可以设些选修课，培养学生的探索精神和业务专长，为学生成长提供良好的土壤。

⑤培养学生的实验操作能力。理论与实践是对立的统一，是认识论中的一个根本问题。坚实的化学基础理论，是指导学生实践的依据。而化学实践又可以发展和丰富理论。这是相辅相成、矛盾运动的关系。化学这门科学，在某种意义上来说，是一门实验性科学。许多物质质变的发现，都是通过化学实验而得到的，其结论往往是通过理论推算而获取。实验在化学发展中是极为重要的。有人统计过，从1901年至1979年，共颁发化学诺贝尔奖金71次，其中有53次是实验项目的成果，约占总奖颁发数的74.6%；从个人来说，获化学诺贝尔奖的是93人，其中实验化学奖的71人，约占76.3%。可见实验在化学发展中的重要地位。

⑥开展自然辩证法的学习，培养学生的哲学素养。现代化学的发展，是由经典、定性、实验等特点向定量化的理论科学发展。伴随着发展，将出现大量的矛盾与哲学问题，如：合成与分解，结构与性能，宏观与微观，量变与质变，平衡与不平衡，等等。若使学生能正确理解和掌握现代化学这些丰富的基础理论知识和矛盾运动规律，就必须注意培养学生辩证思维能力，即哲学素养。

（2）计划培养，开展在职教育

新陈代谢是客观世界不可抗拒的普遍规律。随着社会的前进，科学的发展，知识陈旧率在不断增长，人才也需要不断地发展和更新，以免科技队伍老化和思想僵化。构成世界科学中心的国家，科技队伍的一般年龄不超过50岁，否则就会出现科学事业危机的“病兆”。五十年代，我国科学家队伍还很年轻，平均年龄不到50岁。经过十年动乱，目前已经出现了严重老化现象。据1981年统计，全国自然科学工作者中，56岁以上的老年人约占总数的30%；36岁至55岁的中年人约占60%；35岁以下的青年人约占17%。化学人才也基本上如此。从以上比例可以看出：中年知识分子是科学事业发展的主　军，而青年科技人员则是希望所在。但他们所掌握的知识却远远不适应科学发展的需要。因此，开展继续教育仍是客观所需，时代要求。为了加快化学人才的开发，必须制定一个全面而长期的培养计划，这个计划即是化学专业人才开发的纽带。

在科学实践中，人们的一切活动都是知识深化的过程。培养计划则是这一过程的依据。世界先进国家的化学专业人才之所以平均年龄低，技术水平高，这是与他们最大限度地提高人的知识水平，发挥人的使用价值分不开的。日本许多公司都设有专门的培训

机构，编制月、年计划，全面培训技术人员，为开创新技术进行智力投资。

在职教育的形式，可从实际情况出发。采取脱产或半脱产，也可业余，通过学术讨论会、进修班、学术讲座等多种形式进行。根据当前和未来需要，结合本人的基础和特长，确定学习内容。这种学习应反复进行，坚持不懈，达到智力投资——开发——使用，周而复始的循环运动，以便延长化学人才的科学青春，有利于他们创造性才力的开发。

（3）广泛开展人才交流

人才交流，是人才群体之间互补的调节功能。是与人才辈出、共生的社会现象之一。只有人才正常流动，才能形成人才的动态平衡结构。

我国由于历史上的原因，造成人才畸形分布。有的地区或部门人才奇缺，有的又积压过剩。加之，我们国家长期以来实行统包统配制，往往一次分配定终身。这种分配原则很难合理，造成许多人用非所长；许多研究所和高等院校多代同堂，知识面窄，学术思想不活跃。有的只留自己培养的学生，搞“近亲繁殖”，造成人才退化，眼界不开阔。这样形成的人才“群落”，是以关系学为纽带，靠关系互相依存，思想无压力，工作无动力，很难开发出创造力，也影响到化学人才学术水平的提高。

党的十一届三中全会以来，中央采取了一系列措施促进人才交流。对学非所用、用非所长等问题进行调整，努力做到各得其位，各施其能，为四化出力。许多地区已出现了科技发展、经济繁荣的新气象。

人才交流的根本目的，在于充分发挥化学人才之所长，也有利于交流和传播先进的学术思想，学术观点和道德风尚，使不同的学术群体，不断增加新鲜血液和技术力量，步步登高，生机勃勃。

人才流动的过程也是人才成长的过程。一个人长期在一个单位、一个地区工作，难免造成知识的局限性。通过流动，可以学到新的知识和技术，增长新的才干。这同生物学的“远缘杂交”一样，可以克服“近亲繁殖”的弊端，加速人才的成长。

化学人才的正常交流，还有利于解决人才积压和人才浪费的状况；有利于调解人员关系，克服“内消耗”和“内摩擦”，最大限度地发挥每个化学人才的创造能力，促进化学事业的飞速发展。

（4）鼓励自学成才

“有志者，事竟成”。自学成才已经成为常见的社会现象。许多发明家、科学家都是靠自学获得成功的，古今中外大有人在。他们对在成才征途中，不畏坎坷艰险而忘我挺进的化学工作者，具有极大的魅力。如：蒸汽机的发明者瓦特，就是一位自学成才的发明家，没有上过大学，靠自学与实验制成了双动式蒸汽机，使人类进入了“蒸汽时代”，促进了人类近代历史上第一次工业革命。道尔顿有“色盲”的生理缺陷，但没有影响到他对真理的追索。通过勤奋自学，独立思考而获得的洞察力，使他有可能从存在有缺陷的数据得出正确的结论。从而捕捉住由观察实验提供的现象和线索，运用辩证思维的方法，把原子的存在与运动引向真理的发现，建立起了科学的原子论体系。诺贝尔是自学成才的著名化学家，诺贝尔奖金的创始人。我国化学界也有许多自学成才之士，从知识的必然王国走向自由王国。

走自学成才之路也有求知规律可循。许多人曾总结出：循序渐进律，学思结合律，

薄厚互转律，过饱结晶律等等。它们的内涵分别为：由浅入深，不能躐等以求；学而不思则罔，思而不学则殆；积累知识由薄到厚，把握精髓，则由厚变薄；灵感顿悟并非天启，“溶液”过饱和才易得结晶。

化学自学者还应具备如下素养：如明确的目的，远大的理想，顽强的毅力，强烈的求知欲，酷爱科学和献身精神，承受逆境的毅力，以及适应各种条件和环境的非凡能力。只有掌握规律，学会方法，才能走向成功。

党和政府大力倡导自学成才。通过考试和考核达到标准的自学者，国家都承认学历并给予相应待遇。这对化学人才的发掘和成长具有深远的意义。

（5）大力培植“师徒型”人才群和人才链

本世纪初以来，博采众长、荟萃精英，一批出类拔萃的科学家如群星拱月，围绕着著名核物理学家卢瑟福。1908年，因为发现了原子的天然放射性而获得诺贝尔化学奖。1921年，他的助手索迪发现了放射性同位素也获得了化学奖。次年，他的学生玻尔发展了原子核模型获诺贝尔物理奖。另一位高足阿斯顿发明质谱仪分离同位素获诺贝尔化学奖。过了几年，他的另一名助手威尔逊发明云雾室而获诺贝尔物理奖。1935年，他的学生查德威克发现中子获诺贝尔物理奖。在卢瑟福逝世后的41年，即1978年，他曾培养过的学生卡皮察因对低温物理学的杰出贡献而获诺贝尔物理奖。此外，还有发现宇宙辐射的布莱克特，发明高压倍加器的科克拉夫特和瓦尔顿，用核乳胶探索基本粒子径迹的鲍威尔，提出核反应理论的贝蒂等等都获得了诺贝尔奖，他们都曾受过卢瑟福的培养和指点。仅几十年的时间，卢瑟福的学生和助手竟有这么多人获得诺贝尔奖金。这个人才群的出现，简直是近代科学史上的奇迹。

以科学巨星卢瑟福为核心轴的人才群的崛起，给我们什么启示呢？首先它告诉我们，人才的成长和崛起，名师的指点是极为重要的。科学史证明，杰出的科学家不仅把知识、才能、研究问题的思维方法传授给学生，而且他们非凡的气质和科学魅力，也深刻地影响学生。玻尔非常崇敬自己的老师卢瑟福，在老师的熏陶下，他也具有虚怀若谷的美德。他也非常关心学生，因此，有许多青年科学家聚集在他的周围。在他的培养和影响下，成为杰出者，真是名师手下出高徒。

名师手下出高徒是普遍规律，但也有例外。其主要原因是，老师不善于教，学生无毅力学。结果出现了物理学中的“只用力而无做功”的现象，呈现逆效应。

人们智慧的火花，常常在互相的智力激励中突然迸发，从而产生强大的创造力。这有一个最有说服力的统计，即诺贝尔科学奖金自1901年设立以来，到1972年为止的286名获奖者中，有三分之二的人是因与别人进行合作研究而获奖的。而且，合作研究获奖者占总获奖人数的比例也不断上升，在诺贝尔奖金设立的头25年为41%，第二个25年跃升到65%，而现在则为79%。这是人才互补效应的丰硕成果。

“师徒型”人才群和人才链的实质有二：其一，从纵向看，名师带高徒，可以充分发挥“师承效应”，加速人才成长；其二，从横向看，不同知识和智能结构的人才聚集到一起，互相学习，取长补短，相互砥砺，互相切磋，不断进取，充分发挥人才的“互补效应”，有利于加深和扩大人才的知识域。

综上所述，不难看出，大力发展“师徒型”人才群和人才链，是加速化学人才成长的一条捷径，也是培养化学人才的重要形式和科学方法。

影响化学人才成长的主要因素及其研究

化学人才是社会总体人才的一部分，其成长受社会诸因素的影响。反之，人才也服务于社会，这是内在因素和外在因素相互转化的辩证关系。

影响化学人才成长的社会因素是很多的。但从我国国情出发，其影响因素主要有政策、体制、环境、家庭及年龄。

（1）政策因素

也叫政治因素，直接制约着人才的成长状况。长期“左”的政策，使广大化学人才受到束缚，创造力不能发挥。党的十一届三中全会以后，纠正了“左”的东西，我党从马克思主义基本原理出发，第一次提出了“知识分子是工人阶级的一部分”的辩证唯物主义的论断。肯定了知识分子崇高的社会地位，产生了巨大的社会动力，促进了人才的迅速成长。因此，正确的稳定的社会政策，是保障人才成长的重要因素。

（2）体制因素

体制是实现管理的一种组织形式。僵化的体制或“部门所有制”，可导致人才的积压和浪费。相反，一种优化的群体结构，可以避免人才的积压和浪费。

科学研究和许多工作都有着这样一种规律：开始时需要人少，全面开展时需要人多，收尾时又要人少，如图3.1所示。



图3.1　优化的群体结构

目前，有些化学研究单位却不是这种组织方式，不管工作处于什么阶段，研究组的人数基本不变。再加上“论资排辈”的“传统”，严重的影响了化学人才创造力的激发和贡献的增长。什么样的群体结构为最佳，有待人才经济学的研究者们去探讨。

（3）环境因素

环境是指人们周围的客观世界，其中包括自然环境和社会环境。化学工作者的天资与才能能否得到充分发展，是与他所处的环境分不开的。

自然环境为化学人才的成长提供必要的物质条件，而社会环境的影响却是十分复杂的。

人在环境中运动，总的看，有顺境也有逆境。顺境是环境的优势，可以使人长驱直进；逆境是环境的劣势，如果人们主观努力，也可以化劣势为优势，使人经受磨炼，达到增才益智的目的。

我国是社会主义国家，有优越的社会主义制度和良好的社会环境。在这样的条件下，按理说，化学人才一定能成长得快，成长得好。但也不是绝对的，成功与否取决于主客观因素的对立与统一。客观环境好，主观再努力，人才必定成功；反之，好的环境也不能起到什么作用。但环境对人才发展的影响是经常的，深化的，不可忽视的。化学人才优势的积累，内涵十分丰富，但环境优势是一个重要的内容。

（4）家庭因素

家庭是社会的细胞。家庭条件的优劣直接影响到家庭成员的成长和对社会贡献的大

小。从育儿科学角度看，家庭是培养人才的天然学校。而对化学人才的成长来看，家庭的影响也是因素之一。

优越的家庭环境即经济好，负担小，子女工作无干扰，就可以保证化学工作者集中精力钻研业务，提高水平，促进人才成长。家庭因素呈现正效应。若家庭条件处于劣势，上有老，下有小，收入低，房子小，子女考学也得管，这样的条件无疑要影响到化学人才的成长。

党和国家非常重视改善知识分子，特别是中年知识分子的工作与生活条件，这就逐渐地促进了家庭因素的转化，为人才的成功和涌现创造了必要的条件。但从另一方面看，化学工作者也应积极地克服家庭困难，排除消极干扰，立志迅速成才。

（5）年龄因素

化学人才的优势积累，年龄优势是极为重要的。一般地说，青年时期是从事科学研究的黄金时代。根据国内外许多专家调查表明：一个人从二十几岁开始进入创造性最旺盛时期，中年时期则是人才成功的最佳年龄期。科学发明的最佳年龄规律是：一个科学家在25—45岁之间做出贡献的可能性最大，如图3.2所示。

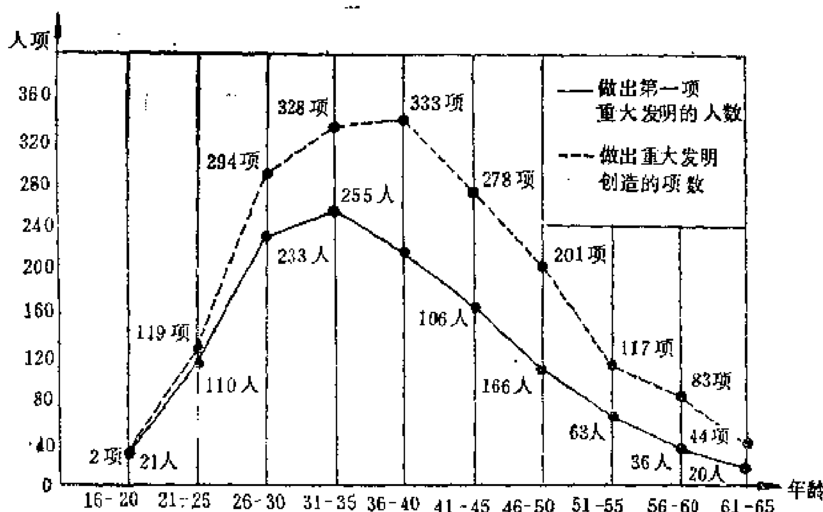


图3.2　人才成功曲线图

（张笛梅同志统计，从公元600年到1960年，共有1243位科学家、发明家做出1911项科学创造发明，据此制出人才成功曲线图。）

由此可见，多数人于30岁左右开始作出重大发明创造；40岁以前作出重大发明者占三分之二；约有60%的重大发明是由40岁以前的年轻人做出的。

有人研究发现：化学家在26—32岁，数学家在30—40岁，天文学家及生理学家在35—39岁，是创造性成果的最佳年龄区。

科学史研究表明：人的科学创造力具有双峰型。所谓双峰型，是指科研人员在25—45岁形成创造力的第一个高峰，峰区在37岁（见图3.3）。45—65岁形成创造力的第二个

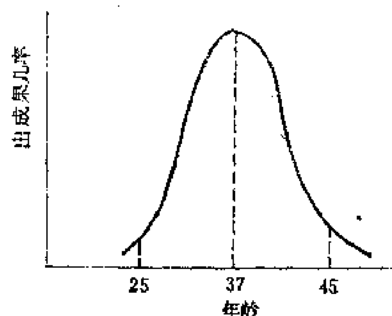


图3.3　世界杰出科学家“最佳年龄区”图

高峰，峰值在55岁左右。铁道部科学院西北研究所王继武同志提供的资料，足以说明（见图3.4）。

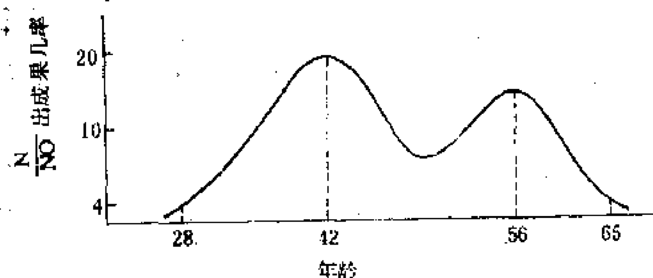


图3.4 铁道部西北所出成果几率图

实践证明：五十多岁的化学人才，只要没有特殊情况，他们的智力仍然处在最佳或次佳年龄期。因为人的大脑相当于140亿个微型电脑组成的巨型计算机，它拥有感受、贮存、判断和想象四个功能区。这四个功能区形成了人的五种基本能力，即观察能力、记忆能力、注意能力、思维能力和想象能力。这五种能力构成了一个互相区别又互相影响的能力系统，这叫做“智力结构”。从生理学的角度说，人到了中年以后，虽然记忆能力有所减退，但理解能力有增加的趋势。科学史研究的事实证明，科研人员在45岁以后，科学创造力才开始走向成熟，在这个时期出现过不少科学上的重大突破。如1982年诺贝尔自然科学奖获得者平均年龄为53.6岁。在1901—1970年间诺贝尔奖金获得者中，获化学奖的平均年龄为51.9岁。化学家巴顿在57岁时还完成了第500篇论文。爱迪生81岁时取得了第1032项专利，等等。可以预测，随着现代科学的飞速发展这样的事例还会增加。因此说第二个峰值有后移的趋势。

科学人才的年龄期有明显的规律性。当他们处在创造性最佳年龄期时，社会应给他们提供最方便的工作条件，激发他们创造力的最好发挥。如果措置不当，比如说当科学家（包括化学家在内）一旦有了发明创造，出了名，而一些领导同志不晓得这是创造性来潮的表现，便马上以“重用”为名迫使他们改变知识结构，让他们兼任许多行政职务，就会阻碍了他们创造性的发展。实际上这是一种违背人才成长规律，不爱惜科学人才的现象，不利于人才的成长和四化建设。

化学人才的成长除受上述几种因素影响外，还有社会动力的因素。例如，及早发现人才，建立奖励制度和晋升制度等等。但晋升什么职称一定要坚持条件。职称应是才能和贡献的函数，不应只是工龄的函数。只有符合能级原理的奖励和晋升才能产生社会动力，促进化学人才的成长。

化学人才的多维层次与动态结构

化学人才有一个明显的层次，就研究所和高等学校来说，第一层次中主要是研究员、教授、专家等，他们学识渊博，造诣较深，是指导研究与教学、培养人才的领导力量；第二层次中大多数是副研究员、副教授、助理研究员和讲师等，多数人年龄处在35—55岁，这是做贡献的最佳年龄期，他们业务基础好，精力充沛，是科研和教学的骨干力量；第三层次中主要是研究实习员、助教及其他辅助人员，多数人独立工作能力不强，正处在学习提高阶段。这三个层次的人员应有一个合理的比例。这个比例应是“宝塔式”的。这种结构，可以避免相同水平的人过于密集，活动不开，造成人才浪费。

那么，化学人才怎样组合才有利于出成果、出人才呢？这是人才结构学的问题，值得探讨。目前，中国科学院的一些化学所有这样一些“结构”特点：

（1）学科结构。根据研究方向和课题性质，有关学科合理搭配。如有机化学、无机化学、物理化学、分析化学和计算化学等等。在一个学术群体里，研究人员与技术人才也有一个比例，多数是1：1，也有的是5：3。

（2）智能结构。“创造性”人才，即指知识丰富，善于动脑，对新事物敏锐，善于捕捉新苗头，富于想象力和创造力，分析和理解能力强的人才。另外，还有“实干型”人才，即指对工作认真负责、踏踏实实，作风严谨，提供数据可靠者。对应用研究来说，“创造型”与“实干型”的比例一般是2：1或“创造型”人才更多些。

（3）年龄结构。对一个科技人员来说，他的才能都有萌芽、高峰和衰退时期。而创造性时期是很短的。目前一些研究所的队伍老化现象十分严重，年龄结构极不合理。这样很难形成一个始终保持旺盛活力的人才群体。

人才群体组合的科学性是非常强的。组合的协调、匹配、合理，就会产生强大的“集体力”和“创造力”。否则就会产生“离心力”和“内消耗”。化学人才的个体，应有不断完善和相对稳定的知识结构，也要有良好的道德风尚。由这样的个体组成的人才群体，各个层次的人员都要有一定的比例，专业、知识、智能、年龄等条件应协调匹配，形成“师徒型”的群体结构。除学术带头人保持相对稳定外，其他人可以根据需要正常流动，形成一个动态结构。这种动态结构能够充分体现“师承效应”和“互补效应”，可以产生一种马克思在《资本论》中所写的那种“集体力”，即发挥1＋1＞2的作用功能。

随着现代化学的飞速发展，一种最优化的多维层次的人才群体结构，将在科学的矛盾运动中不断完善和发展。对化学人才的培养和成长定会起到应有的作用。

刘 永 懋

3.化工职业教育与人才开发

化工职业教育是按照四化需要对广大在职化工系统行业的职工进行再培训的一种社会活动。它是适应我国现代化工生产发展的客观要求而建立的社会主义教育事业的一个分支，属于成人教育。它对化工职工进行政治、文化、技术和化工管理方面的教育，主要目的在于提高广大化工职工的思想觉悟、文化水平、技术素质和管理才能。

近年来，党中央多次指出：人是生产力中最活跃的因素。这里讲的人，是指有一定的科学知识、生产经验和劳动技能来使用生产工具，实现物质资料生产的人。化工职业教育正是要培养这种人，要在科学技术知识与劳动群众相结合的过程中，起桥梁作用。它既是将化学化工科学知识向劳动群众进行普及的桥梁，又是基础理论、应用科学转化为化工生产力过程的桥梁。总之，化工职业教育是开发化工人才的重要手段。

化工职业教育在开发人才上发挥的主要功能

（1）有利才能“键合”

才能“键合”体现在广大职工的文化、技术“双补”提高上，各在其技术生长点上萌发新知；各在其智能链上“键合”新链。才能“键合”还体现在新职工进厂，大、中专毕业生走向生活从事生产，个体进入群体，理论联系实际等方面。在这种两两“键

合”的过程中，需要职业教育，以加速人才个体在群体中的适应和定位。

（2）有助学习新知识

职校是广大职工实现继续学习知识的场所。有了知识的补充，才有产品的更新，生产的革新。如今，化工前沿日新月异。中青年工程技术人员，大专毕业生需补“化工前沿”这一更新课题，有的需返回高校，进行“回归”教育，补化工前沿、电子计算机、系统工程、反应工程、分离工程等。有的拔尖人才可选送深造，攻取学位。这样经过知识更新的人才才符合群体要求。

（3）促进企业革新

职校是引进新知的讲坛，又是探索改革的论坛，还是企业的顾问所与咨询室。

（4）有利发现人才

一是通过培训鉴定，发现人才；二是奖励自学，伯乐识马，鉴定人才。

（5）实现人才储备

整顿企业，消除臃肿，抽调干部，职工轮训，是储备人才的一项有力措施。它能使企业抽调力量先搞智力开发，再作产品开发；先求人才开发，再求企业的生存和发展。

化工职业教育在开发人才上的主要特点

（1）从职性

职业教育对象是从事各类化工生产的职工（成人）。人才开发服从职业需要，即从职性。从职得针对专业，因工种而异，不耽误生产。以业余、速成为主。按职务要求，各有职能标准（应知与应会）。课程配比要相当，要加强应用科学的教学，要配比一定的基础理论。教学形式要灵活。利用成人的工作、生产、生活经验，讲述科学知识，引导其形成科学概念。抓住工厂实际，现场条件，从直观到抽象，从局部到整体，从经验到理论，培养精通理论、长于实践的现代化工职工。

（2）普及性

现代化工生产是社会化的大生产，需群策群力，协同作战。化工职业教育要面向群众，它是学校教育的补充。在当前化工企业中仍有未受过学校教育的“文盲”、“半文盲”，要授以文化知识，它是学校教育的延长。在当前化工企业中仍有未受过正规化学化工教育的“科盲”，需要进行技术教育和技术补课，它是学校教育的完善。科学在发展，学校教育无法解决广大化工职工知识的补充，这一任务归于职业教育。从一定意义上说，职业教育担负起了化工职工的“终身教育”的重任。

（3）求实性

化工职业教育是化工劳动力的再生产，培养出的人才要面临生产的严峻考验，教育得见实效。求实性表现在人才培养上要讲求质量，按才编班，因材施教，严格考试，严肃对待质量验收。职工中学、中专要与同级学校同要求；电大、职大要达到大专标准。求实性还表现在教学方法上应灵活多样，既有函授、刊授、广播教学、电视授课；也有岗位练兵、现场观摩；也可以有学术讲座、技术交流、经验总结、设计探讨等。

化工职业教育在开发人才上应遵循的主要原则

（1）能质能级培训原则（质能原则）

化工研究的焦点在于物质的质与能，化工人才开发，也有一个质能问题。人才个体相互间有质的差别，应划分能级，亦即任人唯贤、知人善任。贯彻人才质能原则，方能因材施教，培训有方，方能人尽其才，用人得体。因此遵循人才质能原则，在培训上关系极大。

质能原则在化工职业教育开发人才上具体体现在：

第一，人才培训上的多层次。有人才能级梯度，进行链式开发；按文化梯度划分为：扫盲、初中文化补课、高中文化补课、技工培训、职工中专、电大与职工大专、大学送培、工程师补外语、中青年技术人员补化工前沿课程、直至高级工程技术人员出国考察等。

第二，人才培训上的多类型（多种形式和多种类别）。所谓多种形式是指：短训、轮训、进修、专修、专题研究等等。时间有长短，质量有高低，内容有差异。所谓多类别指的是：化工行业多，产品品种多，操作工种多，技术学科多，按科编班，因科施教，安排具体，实事求是，讲求实效。

多层次是人才链式开发的纵向深入，多类型是人才链式开发的横向延伸。纵横交错，形成网络，造就化工企业的人才群体。

（2）最佳结构培训原则

人才群体的最佳结构乃是人才个体的最佳组合。最佳组合即是群体有一坚实核心。核心最佳至关重要，厂长办公室是化工企业人才群体的管理枢纽；总工程师室是化工企业人才群体的技术中枢。两者坚实和配合协调才有最佳的管理，最佳的技术。但光有领导核心的最佳结构还不够，还得有职工群体的最佳结构，即要有工种齐备、技能全优、各在其位、各尽其责的职工群体。

（3）互补有成培训原则

当今科学发达，边缘增多，知识纵向深入，横向延展，科学攻关，单枪匹马，难以取胜。生产攻坚，更需要综合作战，才能成功。钱学森曾指出，现代科学技术研究，不能靠一个人的劳动……百分之九十五的科学技术研究要靠集体，不能靠单干，单干没有生命力。化工企业大生产更是如此，要靠领导与群众，靠多学科与多工种，靠互补合谋的协同作战，才能把企业办好，把生产搞上去。化工职业教育遵循了人才开发上的互补有成原则，工作中应坚持下述两个论点：

第一，规划（计划）上的两点论，即：既考虑政治人才的开发，又考虑技术人才的开发；既考虑领导干部人才的开发，又考虑职工群众人才的开发；既考虑生产技术人才的开发，又考虑管理人才的开发。

第二，教学安排上的两点论，即：既考虑应用科学的教学，又考虑基础理论的教学；既考虑生产技术的培训，又考虑生产理论的传授。

（4）体系开放培训原则

化学将研究对象称作体系，以区别于体系外的环境。体系有隔绝体系、闭合体系、开放体系。从某种意义上说，人才个体与人才群体均属开放体系，它与环境既不能隔绝，又不可闭合，而是与环境既有物质交换，又有能量交换。松柏之树常青，在于它的新陈代谢，在于它与环境不断地进行质能交换。人才个体与群体的生命之树常青，也在于它与环境相互依存，在于它与外界信息相通，情报交流。

化工职业教育在人才开发上的开放体现为：①请进来，派出去。即请归国学者、外籍专家、高等院校教授、讲师、科研机关的研究员、工程师进厂讲学、授课；派骨干出外学术交流，技术考察、出国深造。②在引进先进技术与设备的同时，请外籍专家进厂作引进技术培训。③热情接待外界来厂的参观来访，保持与外界经常不断的信息交流。④充实图书资料、外文期刊、现代化教学设备。

化工系统业务繁多，涉及地质勘察、化工科研、化工设计、化工安装、化工机械制造、矿山开采加工、石油炼制、有机合成、无机酸碱、化工环境管理及保护研究等。同时，化工企业生产工艺复杂多变，需多种特定反应条件如高温、高压、深冷、真空、耐腐蚀、防燃、防爆、防污染；需连续、自动。总之，化工系统知识密集，必须加强智力投资。

化工职业教育在改革中的主要工作

（1）加强基地建设。化工企业要进行企业改造、产品开发，则要开展深度加工，加强精细化工。要革新、挖潜、提高经济效益，这就要求化工职业教育不仅培养简单劳动者，还要培养复杂劳动者，职业教育质量要提高，基地建设要加强。

（2）开展群体结构研究

化工企业的人才群体有其自身发展规律，合理的人才群体结构必将导致最优的经营，最好的管理，最佳的技术，最大的经济效益。根据国外研究，技术人才的组成由技术员、工程师到高级工程师应是宝塔形构型，方能基础稳固，效率显著。而当前化工技术人才构型多是菱形构型，即工程师队伍数量庞大，技术人员数量远远不足，配比失调，致使工作效率低，质量差，为此，高教、职教、中专教育都得研究化工人才群体结构问题，做好定向、定量培育。

（3）开展人才预测

化工职业教育“双补”提高，只是初级台阶。要使化工科学前进，生产发展，化工职业教育不能停留，要上高级台阶。这就需要深入企业、定位观察、探索人才群体的发展动态，促进人才需求预测。这样才能制订出长远而又科学的职业教育规划，短期而严密的职业教育计划。

为了作好人才长远规划，人才预测，应特别做好下面三项工作：①专门人才状况调查。做好本系统专门人才包括学历、专业、职称、年龄四个参数的调查汇总。②预测2000年和1990年两个目标年度，本系统对研究生、大学本科、大学专科、中专四个学历层次人才的需求数，按专业分类汇总。办法可采取典型抽样、解剖群体，推算覆盖，统计归总求得需求数。③做好高等和中等专业学校、职大、电大、职工中专等学校的状况调查，和未来培养容量、培养条件的预测工作。

张振纲　曹仁德

4.化学实验在人才培养中的意义

培养化学人才要注意基础扎实，全面发展，既能掌握熟练的实验技能，又有比较雄厚的理论基础。然而现实当中有两种不同的倾向：一种是强调理论重要，忽视化学实验

的巨大意义，另一种是强调实验重要，忽视理论应有的地位和作用。近些年来，在我国化学教学中（包括中学和大学）的主要倾向是前者而不是后者。究其主要原因有三：（1）一场文化大革命的浩劫严重破坏了学校的教学规律，削弱了学校的经费，许多学校的药品仪器奇缺实验条件很差，有的中学真是“一穷二白”，无法进行实验教学。中学教师队伍中相当多的人是文化革命中间补充进来的，缺乏实验的基本训练。显然这样的教师培养出的中学生进入大学后在实验方面大多表现出“先天不足”。（2）对化学科学的两个基本方法的相互关系，即实验和理论的关系缺乏正确全面的认识，有片面性。这种认识上的片面性也造成重理论轻实验的现象。（3）随着计算机的广泛应用，带来一种错觉或错误认识，似乎计算机可以代替化学实验了，只要发展计算机技术化学问题就可解决无需再作实验。

忽视实验的问题，实际上涉及物质条件和思想认识两个方面。改善物质条件既要有切实可行的措施，也需要有对实验课重要性的正确认识。在学生中更应该从认识方面加以解决。对部分教师中忽视实验课问题，除去从认识上解决以外还应当从政策上给以保证。总之，解决好认识问题是正确处理化学中实验和理论两者关系的关键。

从化学的历史发展考察实验与理论的关系

化学是自然科学中一门历史悠久而重要的科学。化学在走上科学道路以前，有一段漫长的生产知识的渐进积累过程。

在古代和中古时代的化学，主要是直接以生产工艺的形式出现的，实验还处在萌芽状态；有关的书籍只是操作经验的记录、工艺过程的描述等，还没有成为一门科学。

从十七世纪后期到十九世纪末，化学在大量实验的基础上建立起初步的理论。化学成为一门实验科学。这个特点明显地反映在波义耳，拉瓦锡和道尔顿等近代化学代表人物的研究工作中。

波义耳把严密的实验方法引入化学，并在此基础上给化学元素下了一个比较科学的定义。波义耳认为：“人之所能效力于世界，莫过于勤在实验上作功夫。”“在将所要解决之一切现象尚未悉心观察以前，不要成立学说。”①这个观点代表了波义耳从事化学研究的指导思想。

波义耳正是在广泛的实验基础上提出了元素定义。虽然从现代观点看，这个元素定义是指单质，但是可籍以区别单质、化合物及混合物。为研究物质的组成指出明确的方向，从而成为化学发展的新阶段。正是这些原因，恩格斯明确指出：“波义耳把化学确立为科学。”②

近代化学的另一位奠基人拉瓦锡，特别注意在实验中使用天平，运用定量方法。他在重视实验的同时，还重视在实验基础上的理论概括。他主张对大量的实验现象进行深入的分析，不轻信传统观点。他曾在日记中写道：“我感到必须把从前人们所做的一切实验看作只是建议性质的，为了把我们关于空气化合或者空气从物质中释放出来的知识，同其它取得的知识联系起来，从而形成一种理论，我曾建议用新的保证措施来重复

---

① 丁绪贤：《化学史通考》，商务印书馆，1936年，79页。
② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，163页。

所有的实验。”① 这个正确的指导思想成为拉瓦锡在化学上进行革命的基础，终于导致他于1777年提出氧化燃烧学说，否定了统治化学近百年的燃素说；并于1789年通过定量实验，正式阐述了“物质不灭定律”。此外，还提出，元素是“分析所能达到的终点”，“因为我们至今还没有发现把它们分开的方法，我们才把它们看成简单的物质，我们永远不应该假定它们是复合的，除非实验与观察证明它的确是这样”② 的见解。

道尔顿提出科学原子论，开辟了化学的新时代。道尔顿的原子论有两方面的来源：一是牛顿原子论的影响、二是他自己长期的实验工作，这是主要方面。道尔顿数十年业余研究气象，对大气的成份、性质做过细致观察，研究了蒸气压、混合气体分压，气体扩散以及温度变化对气体体积或压力变化的影响等等。这些实验成为道尔顿建立原子论的有力根据。1803年道尔顿提出关于原子量计算的论文，引起化学界的普遍重视，其原因是：把实验获得的现象上升为理论，显示出理论的重要；其次，初步计算了相对原子量，并提出测定原子量及化合物组成的任务。从而促进十九世纪前半个多世纪的化学（包括实验和理论）不断向前发展，进而充实和完善原子论，使之形成为原子分子学说。在这个发展过程中，化学的实验与理论紧密关联：一方面，把有关的各种实验方法贯串起来，给以合理阐述，发挥了理论指导作用；另方面，在大量实验的基础上提出理论，而理论出现后，又引导着一系列新的实验，进一步使理论得到检验，修正、丰富和发展。总之，从实验中概括出理论，理论进而又推动着实验的发展，接着理论又获得完善和提高。这样就形成了实验——理论——实验——理论的发展链或上升链，二者相互联系，相互促进，相互补充。实验和理论的统一成为近代化学具体的形式和内容，离开任何一方，都不能称其为近代化学。

近代化学各领域所取得的进展，充分反映了化学实验和理论的这种统一所带来的成果。十九世纪后期发现了元素周期律，使元素系统化，成为无机化学的突出成果。分析化学发展成系统定性分析和定量分析，贝齐里乌斯创造性地提出很多新的分析方法，新的试剂和新的仪器设备，把定量分析的精确性提到新的高度，随着各种滴定分析的发展，使定量分析系统化。在提纯、元素分析、有机合成和有机结构理论等方面都有了空前提高和发展，有机化学成为一门重要的实验科学。物理化学在十九世纪末打下初步基础。

以上成就构成近代化学发展的总貌。应该指出，尽管这个时期的化学有了一定的理论，但仍以实验为主，经验性还很强，化学仍然是一门实验科学。

现代化学发展时期的实验和理论

现代化学与近代化学相比，无论在实验方面，还是在理论方面，水平都有了显著提高，进入一个新的发展阶段。

实验方面，主要表现在实验手段的不断革新，各种新仪器的使用成为深入探索化学世界奥秘的有力工具。这些仪器的发展是在无线电电子技术、真空技术、高能技术、高温技术、高压技术、激光技术、低温超导技术和计算机技术等发展的影响下发展起来

① 梅森：《自然科学史》，上海人民出版社，1977年，287页。
② 柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，143页。

的。化学实验的工具向着仪器化、自动化方向发展。实验的水平向着精确、灵敏、快速和微量方面发展。新仪器的大量使用，大大加强了人类对各种化学现象的认识能力，由物质的宏观性质深入到微观内容，并促使宏观与微观结合起来，从而更深刻地认识化学世界。

各种新仪器新技术的使用，从不同的角度对分子微观结构进行探索，提高了对分子结构、物性和化学反应机理的认识，对于检测微量、超微量及痕量成分，对于难分成分的分离和分析都起到满意效果；在化学的许多方面开拓出广阔的领域。

化学理论的四大支柱、二十世纪以来都有显著发展。在二十世纪初，由于活度和逸度的提出，实际体系对理想体系的偏差修正统一起来，两者有着相同的热力学关系式，从而促使化学热力学的理论基本成熟。化学统计热力学成为沟通微观客体与宏观性质的理论。化学动力学的过度状态理论阐明了活化能的本质并原则上能够计算出活化能值。链反应的发现，致使由总反应动力学进人基元反应动力学的研究。特别是由于激光的发展及其向化学领域渗透，产生了激光化学，为化学动力学研究开辟了引人注目的前景。尤其对于定向反应、加快反应速率、反应的中间态和吸附态以及对多相反应的研究已成为一个大有可为的方向。分子束技术的发展，对微观动力学的研究又提供了新的有力工具。但是总的看来，目前化学动力学的理论还落后于实验。

量子化学的兴起，把化学理论的发展推进到一个新的阶段。如今，量子化学的概念，方法广泛渗透到化学的许多分支，如无机化学、有机化学、合成有机、生物化学、化学动力学等。量子化学研究方法的特点是运用抽象的理论思维和周密的数学计算去研究化学物质的微观结构与宏观性能的关系，以及微观结构及化学反应的本质规律。但是，应充分认识到，量子化学的理论尤其是化学键理论都是在实验的基础上发展起来的，都是为了解释某些实验现象而提出的。这些理论在指导新的实验测定工作、合成新的化合物等方面均显示出一定的科学预见性。六十年代初合成的分子氮络合物就是成功的例子，因而再次引导着理论的发展。理论对实验起指导作用，同时实验又检验了理论。近二十年来大型计算机的发展和应用，建立起计算量子化学，增强了量子化学的理论意义。例如，由计算机计算稳定分子的几何构型，可以跟踪化学反应的过程。以微观结构参数为原始材料作为输人数据，可对图谱与资料进行储存和检索，核对和鉴定未知化合物的成份和结构，而对数值的计算和处理则能直接显示结构。根据已经归纳的化学知识进行一定模拟和逻辑推理进行分子设计，为未知化合物提供合成途径。分子设计如今并不是“一种幻想”，而是可以实现的目标，这种发展状况反映了实验与理论关系更为密切的一种新形式。理论预见了某些实验结果，但是这并不意味着实验失去在化学中的重要地位。理论在现在和将来都不可取代全部实验，实验仍然是基础的和大量的。理论只有与实验一起向前发展，才能不断揭示化学世界的客观规律。

现代化学的发展，不单纯是实验——理论——实验——理论的一条发展链。而且，出现了实验与理论相结合取得成果，双双共同发展的现象，从而构成现代化学发展的一个新特点。量子化学家霍夫曼长于理论工作，同时也重视实验，著名有机化学家伍德沃德长于实验工作，同时也重视理论。他们二人合作，创造性地提出了分子轨道对称守恒原理，从而发展了量子化学理论。显然这一理论的发展是理论与实验紧密结合、共同发展的结果。

通过对化学史的考察及对现代化学发展状况的分析，不难得出结论，化学离开实验不能提出理论，化学离开实验，理论得不到证实，化学离开实验不能发展。化学的发展要以大量实验为基础，实验是化学发展中最活跃的因素。一句话，化学离开实验就不能成为化学。同时还必须看到，化学理论对实验所起的指导作用，而且这种作用不断在扩大，理论的相对独立性在增强。

化学实验和理论探索的重要目的之一是为了认识化学现象的规律，实验所获知的现象应当上升到理论高度来认识。从这个意义上讲，实验是为探索理论服务的，过份强调现代化学的实验方面，忽视化学理论的观点，必然使化学降低为盲目摸索的纯实验，因而也就失去了科学性。化学理论的作用是为了更有效地进行实验，化学的理论必将不停顿地向前发展。理论总是反应人们对客观事物在某一历史阶段，某一水平上的认识程度。当实践（包括实验）引导人们认识发展的时候，理论的不足之处就显现出来。这样理论又在新的实践基础上向前发展。

现代化学的发展分支越来越多，同时又走向综合，实验的要求不断提高，理论也不断加强，再象十九世纪那样要求一位化学家在实验上与理论上都精通，困难是比较大的。科学的发展要求分工合作。分工是要求以某一方面为主，而对其它方面则应具备必要的基础准备和正确的认识。从事化学实验与理论两方面工作的人应该密切合作，主动相互配合，在这种合作中把实验与理论高水平地统一起来。

综上所述，化学中的实验与理论是相随前进的，是相互联系相互促进的。实验和理论构成了化学这门基础科学的全面内容，二者是具体的历史的统一。片面强调一方，忽视另一方，都是不合乎化学发展实际的，因而对化学的发展也是不利的。无论从事实验和从事理论研究都可以取得重大成果，都能推动化学的发展。而且这些成果常常是相互制约着的。

实验在培养化学人才中的作用

从化学本身的特点看，实验是基本的和大量的，所以从事实验工作的人员也应是较多的，而从事理论工作的人员也是必不可少的，但是数量不需过多，两者要有一个合理的比例。这种科学分工亦是化学在现代发展中提出的一个新问题。既然实验是基本的和大量的，所以合格的化学实验工作人员的需要量也是大量的。这说明了培养大量化学实验人才的重要性和迫切性。何况培养合格的化学人才，基本内容之一就是通过实验课的长期培养和锻炼。实验在培养化学人才中有以下几个方面的重要作用。

（1）培养学生学习化学的兴趣和积极性。中学设实验课，初中做演示实验，高中应安排和指导学生实验小组活动。这样对于激发初中学生的好奇心引起青少年学生对化学的兴趣，调动学习积极性提高教学质量有很大好处。让高中学生亲自参加实验小组做一定数量的实验，不但能培养学生手脑并用的好习惯，还能巩固学生所学化学知识，提高学习效果。为学生进入高等学校作一定的准备。这不仅将使高等学校各专业的学生有一个好的知识起点，特别是对化学专业方面的学生来说有一个较好的预备条件。

（2）培养独立工作能力的基本功。化学实验的基本功很重要，化学系的一个大学生有没有良好的独立工作能力，很大程度上决定于他的实验基本功是不是过硬。如果这方面很差，不可能是一个合格的化学系毕业生，更谈不上优秀了。

事实上化学系学生独立工作能力的基本功应包括：①熟练掌握各种操作技术。诸如，能制作简单玻璃工具，使用各种玻璃仪器、物理仪器、计算仪器，进行试剂和溶液的配制，以及成套实验装置的设计和组装等。②观察能力的培养。有敏锐的观察能力才能发现新问题，而这种能力只有在实验过程中培养锻炼。③通过实验获得准确的结果。化学史上由于实验结果准确获得成就的化学家颇不乏人。

（3）培养严谨的学风和科学态度。一个合格的化学工作者，要求有严谨的学风和作学问的科学态度。反对学术上的各种不正之风。这种严谨的学风和科学态度常常在实验课的长期熏陶中得到培养。实验本身是严谨的，谁要马马虎虎应付，粗心大意，不认真对待，往往会遭到实验结果的报复，不能给出满意的结果。关键是在培养过程中老师的严格要求，实验数据不合格，结果不准确，应当要求重做。使学生不能存有侥幸心理，更不能弄虚作假，这样久而久之就可培养起严谨的作风和科学态度。这种严谨的作风和科学态度不仅表现在实验过程中，还体现在实验过程中的记录和实验报告中，后者应该忠实反映和总结了实验的过程和结论。

（4）通过实验培养学生的唯物主义精神。化学实验是实践的一种形式。辩证唯物主义的认识论把实践提到第一的地位，列宁指出："实践高于（理论的）认识，因为它不但有普遍性的品格，而且还有直接现实性的品格"①。理论的基础是实践，又转过来为实践服务。理论是否正确，依实践的结果而定。实践是检验真理的唯一标准。实践的观点是辩证唯物主义认识论的第一和基本的观点。因此学生在学习过程中通过化学实验的具体活动，加深理解所学的化学理论知识，既提高了学习效果，又培养了唯物主义精神。

总之，化学实验在培养化学人才中的作用是多方面的，意义是深远的，既有实际意义又有哲学意义，应当引起人们的足够重视。

张家治

5.培养富有创造精神的化学人才

化学科技人才要具有会做实验的灵巧双手和善于理论思维的大脑，最好有象爱迪生和爱因斯坦式的化学科技人才大批涌现。

爱迪生是擅长实验，搞应用发明的科学家，他一生中有两千多项发明，可称为"发明大王"。当他在考虑搞电灯发明的同时，还穿插着研究电话和电报，又研究发明了留声机，但还随时注意电光源照明的资料……。他侧重多路思考，使几个课题的研究互相启发和促进，硕果累累。

爱因斯坦是擅长理论思维，搞理论研究的科学家，成为二十世纪的科学巨人，是善于搞基础研究的典型。他善于抓住关节点。如在16岁时就提出一个悖论并进行深思，经过十年研究发表了狭义相对论（1905年）。他侧重于单点深入地思考，认为对这个世界的凝视、深思，就象得到了解放一样吸引着我们。他对世界之谜提出深刻的问题，进行专心致志的研究，创造了举世瞩目的成果。

---

① 列宁：《哲学笔记》，人民出版社，1956年，201页。

具有爱迪生式的搞应用研究的人才固然不可少，具有爱因斯坦式的搞基础研究的人才更难得。多路思考和触类旁通的人才使创造发明层出不穷，单点深入和专心研究的人才使科学理论不断发展完善；应用研究和基础研究是相辅相成的，多路思考和单点深入也是缺一不可的。其实，爱迪生和爱因斯坦都各自兼有这两方面的才能，又各有自己的侧重面。他们研究的重点和方法虽然各有千秋，但是成才之路是相似的。

（1）具有强烈的事业心，从小培养了阅读自学的能力。爱迪生认为自己的人生哲学就是工作，就是要揭示自然的秘密并利用它们为人类造福。爱迪生只上了三个月小学，以后是在他母亲指导下自学成才的。爱因斯坦在12岁就自学欧氏几何，他经过艰苦的努力，根据三角形的相似性成功地证明了毕达哥拉斯定理，觉得直角三角形各个边的关系显然完全决定于它的一个锐角。他在12—16岁时熟悉了基础数学，包含微积分原理。

（2）具有高超的观察和实验能力。爱迪生十岁开始自己独立地在家庭等地方动手实验，使他获得丰富、生动的知识，也是他发明创造的源泉。如他为了找电灯的灯丝，曾在1600多种不同的物质中筛选，花了三年时间才有成效。他在75岁的古稀之年，仍在实验室内每天顶两个班。爱因斯坦是善于在思维中构思“理想实验”的典型。两位科学家的这种孜孜不倦地一生从事实验的精神很值得我们效仿。

（3）具有理论思维能力和创造才能。爱因斯坦的理论思维能力很强，他是古今科学史上一个十分突出的具有科学的怀疑精神和批判精神的科学家。他主张“思维的自由创造”，并主张经验事实不论收集得多么丰富，仍然不能引导到提出如此复杂的方程。一个理论可以用经验来检验，但是并没有从经验建立理论的道路。爱迪生则是把“不下决心培养思考的人，便失去了生活的最大乐趣。”作为座右铭。

有人赞叹爱迪生是“天才”，他却认为天才是百分之一的灵感，百分之九十九的勤奋。爱因斯坦认为成功的公式是W＝X＋Y＋Z，即成功等于刻苦努力＋正确方法＋不说废话。可见，两位科学巨人的见解是不谋而合的，离开了勤奋，任何天才都会夭折；只有勤奋和毅力，才能有所发明和创造。正如马克思说的：“在科学上面是没有平坦的大道可走，只有那些在崎岖小路的攀登上不畏劳苦的人，有希望到达光辉的顶点”①。

从爱迪生和爱因斯坦的成才之路，可见培养人材，基础和提高都要注重，基础牢固了，才能建造宏伟的大厦，对化学的启蒙和基础——中学教育重视不够，难于造就出类拔萃的化学科技人才。目前，高等院校和科研单位固然需要加强，中学教育更应引起各方面的重视。

重视改进化学的启蒙和基础教学

据调查，对成才影响最大的是在高中阶段，而影响因素最大的人物则是任课教师。一个人由少年进入青年时期具有强烈的求知欲和探索精神，是世界观逐步形成的阶段，是由基础教学进入高等专业教育的转折点，容易受任课老师的熏陶而自觉地选择终身奋斗的方向。如陈景润在中学里受教数学的沈元老师介绍的哥德巴赫猜想题所吸引，经过他二十多个冬春的努力，才有所建树。目前的青少年到2000年正当是三、四十岁的黄金时

---

① 马克斯：《资本论》，人民出版社，1953年，24页。

代，是出成果、作贡献的最佳年龄，所以必须高度重视化学的启蒙教学和基础教学，使中学阶段的化学教学能激发广大优秀高中生去报考化学专业，才能为我国输送一批出色的化学科技人才奠定坚实的基础。

中学教学过程中，学生的认识活动主要是继承人类知识的精华，而不是自己去发现；主要是来源于间接经验，而不是直接经验。化学实验虽然是通过学生亲自动手来获得知识，但也是沿袭前人用来验证理论的一种手段。一个学生在未进入社会前学到的知识，一般不拿到实践中去直接应用。因此，学生获得知识与认识论中的实践——认识——实践不同，对中学生来说，前一个实践是以接受前人的为主，后一个实践大量的在于将来。所以，学生增长知识是人类认识客观世界的一种特殊形式，很有探讨的必要。

（1）要正确理解教师的主导作用，培养学生的阅读和自学能力。

教师主要的职责是将知识传授给学生的同时，培养学生的能力和世界观。教师的主导作用应理解为："主"是指教师的主要职责。"导"是开导、引导、疏导、诱导，而不是以教师为主来行使权力，强迫学生接受知识，或者是主宰课堂四十五分钟，滔滔不绝地满堂灌。教学中的主要矛盾是"教与学"、"讲和练"，即教师的讲和学生的练是贯穿整个教学过程的主线。但矛盾的主要方面应随着时间、地点、条件而有所变化。教师的"教与讲"与学生的"学和练"，要随着学生知识和年龄的增加而有所变化，一成不变的矛盾是不存在的。一般地说，启蒙时期应以教师为主，讲为主，到了高三复习时应以学生的学为主，练为主。教师的导，应根据不同学生来采取不同的导。总的来说是开导，即启发式教学。对一般的学生用引导，要讲练结合；对程度好的学生采用疏导，疏通学生在学习上的几处障碍，让学生以自学为主来获得知识；对程度较差的学生要诱导，即根据学生学习的不同情况激发学生学习的兴趣，让学生在教师诱导下，自觉地学好功课；对个别差的学生，教师应首先主动，热情地及时弥补其基础知识上的缺陷，使他们及时地跟上中等水平。

初三化学是起点，除培养学生有浓厚的兴趣和传授入门的化学基础知识以外，还应该培养学习化学的方法和掌握化学知识的各种能力。所以应该选派优秀的化学教师去做启蒙老师。让学生开始接触化学就在好老师的熏陶下茁壮地成长。如培养学生的自学能力和阅读能力，不要认为初三学生已念了七、八年书，认识字，阅读似乎不成问题，其实不然，只可说能读书，但还达不到会读书。因为化学科学一是有它独特的阅读重点和方法，二是还有阅读的速度和效果等问题。这些都需要有老师悉心指导的，如初三第一堂课的绪言①，共有3500字之多，若让学生自己泛泛地读，不会抓重点，花时间多而收效甚微。因为在教材中一般包括有常识性的、基础知识和基本技能三方面的内容，但多半是常识性的，约占75%或更多一些。假若把这些常识比喻为"绿叶"，那么学生理解好这些"绿叶"后，无疑的对于掌握双基（基础知识，基本技能）这朵"红花"是有力的，但"绿叶"毕竟是起衬托作用的，可以粗读、略读，领会意思就行。对于基础知识则要求细读、精读，反复思索而达到理解和掌握。化学的重点是研究物质的组成、结构、性质和变化等。如初三课本绪言中属基础知识的内容是两种变化（物理、化学）和两种性质（化学、物理），共有110字，约占总数的3%。这堂课可以从教师的演示实验开始，

---

① 中学化学编辑室：《化学》（初级中学课本），人民教育出版社，1982年，1—7页。

让学生观察实验，共同得出两种变化的不同，推广到两种性质，然后引导学生阅读课文，重要的地方让学生画线标记下来理解和默记一下。这样做，学生可以集中精力观察实验和思考、理解，这比教师按照课本摘要板书，然后要求学生记下的效果会更好一些。

阅读和自学能力要逐步培养，如初中课本氧气的制法一节，不仅要学生掌握制氧气的方法，更重要的是理解分解反应，催化剂的概念；高二的有机化学的重点是由分子结构（官能团），推导出化学性质、用途及制法等方面。总之，学生的阅读和自学能力是在教师指导下由学生自己领悟出来的一种能力。到了高中毕业总复习时，应以学生自学为主，让学生提出问题，教师起到疏导、点拨作用，如果教师还是泛泛地讲，效果就不一定好。因为知识必须由学生通过自己用脑思索来获得，掌握得才牢固。

（2）运用化学实验来激发学生的兴趣和培养观察与实验能力。

化学知识来源于实验，培养学生的观察与实验能力是学好化学很重要的方面。实验是使知识生动活泼的再现，常给人们以深刻的印象和无穷的回忆，也最能调动学生学习化学的兴趣和积极性。我国著名的物理化学家黄子卿教授反复强调要重视实验，这是学好化学最重要之点。他自己身体力行，十分重视实验操作和实验数据，注意实验结果的精确性，并致力于实验室的建设。1982年出版的初中化学课本已注意到这一点。如学生首次听化学课时就能看到镁在空气中燃烧等演示实验。青少年们好奇心强，对观看实验很感兴趣，若老师不预先引导学生应注意观察什么，让学生凭个人爱好自由选择观察某一现象，结果得出的结论将是五花八门，有的抓不住要害，达不到目的。所以一定要有老师事先强调应如何观察，观察哪几点。如先观察镁条形状、颜色等性质，点燃后要注意看发出耀眼的强光（叫学生不要正视防止伤眼），坐在讲台前排学生感到有热量放出等，把生成物质的性质和反应前的物质（镁）作比较，让学生自己得出产生了新物质（氧化镁）等等。这些细节都要交代清楚，才能集中学生的注意力，达到演示实验的效果。同时，也培养了学生对化学实验的观察方法以及实验的操作方法，如点燃酒精灯的先后次序，用坩埚钳夹住镁条在火焰的外焰加热等等。

经过训练和没经过训练的学生，对于同一事物的观察能力是大不相同的，这要逐渐培养。就是同一个实验，在不同的学习阶段也应有不同的要求，如锌与稀硫酸（或盐酸）反应的实验，在初中课本第二章氢气的实验室制法中，先在试管中演示锌与稀硫酸的反应的实验，让学生观察两项，有气体冒出，溶液蒸干得到新物质——硫酸锌。初中课本第五章锌与盐酸、稀硫酸反应中，观察两项（同前）和一项检验产物，生成的气体是氢气。在高一课本第一章离子反应中，锌分别与稀硫酸、盐酸的两个同时反应的实验，虽然仍观察两项和一个氢气的检验，但要由学生得出相同的结论，然后可以归纳出氢离子与金属的离子反应式的写法。到高二课本第一章原电池中，同样锌与稀硫酸反应要观察四项：锌的溶解、氢气的放出和有热量放出，若用导线接通锌片与铜片后则氢气在铜片上放出。在学生自己动手实验中还要加上锌中有无杂质（滴加硫酸铜与否）时对氢气放出速度不同等更多项目的观察。又如硫酸亚铁溶液中滴人氢氧化钠时，开始产生白色胶状沉淀，但时间很短，学生注意力要高度集中才能发现。并注意氧化过程中颜色由白色⟶浅绿色⟶灰绿色⟶红褐色的变化。总之，随着学习的深入，观察项目也逐渐增加，要求也逐步提高，只有不断使用感官，才能促进青少年的感官的发展和见微知著的

思维能力。

除培养观察能力外，更重要的是训练学生的实验技能，要充分运用实验室并创造条件，如有的学生实验可用盒子盛仪器、药品等进课堂。学生实验尽量达到每人一套或两人一套仪器，让学生独立地做实验。目前各地正在推广边讲边做的实验课，这是提高中学化学课堂质量和培养学生观察和实验技能的好形式，应由上级领导重视并调拨经费，促进这种课型的普遍开设和创新。只有让学生动手的机会增多，实验技能才能达到熟练的掌握。对于基本操作要高度重视，严格训练，发现学生操作上的缺陷应及时纠正，务必使操作规范化。这样开始时多花些时间和精力，一旦让学生掌握了，这是受益终身的技巧，就可节省时间并且保证质量和事业的胜利完成。

同时，应积极创造条件，成立化学课外活动小组，让学生的手、脑并用。因为通过实验获得的知识才是丰富和牢固的，同时使青少年们产生浓厚的兴趣，使他们自觉地学好化学。若学校能给予少量的药品和找些代用品（如针瓶、药瓶可代替试管、广口瓶，用点燃乌洛托平药片代酒精灯来加热等等），可让热爱化学的青少年，在家庭内也能动手做实验。这样做可使学生由兴趣而进一步树立为化学科学奋斗终身的雄心壮志。

（3）培养学生的逻辑思维能力和创造能力。

逻辑思维是获得知识和搞科学研究的必要工具，中学生也很需要逻辑思维。逻辑思维包括形式逻辑和辩证逻辑两类。形式逻辑是侧重讲形式思维的科学，是初等的、形而上学的，特点是“非此即彼”；辩证逻辑即辩证思维，恩格斯说：“它使固定的形而上学的差异互相过渡，除了‘非此即彼！’，又在适当的地方承认‘亦此亦彼！’”①，即用唯物辩证的方法研究思维的科学。对于一个中学生来说，要从培养形式逻辑开始，这是从学生的学习效果考虑的，因为只有学习静态知识，才能进一步把知识变成动态，加以辩证的理解。先讲“静”的知识，再学“动”的知识才易被学生接受。正如列宁所说：“如果不把不间断的东西割断，不使活生生的东西简单化、粗糙化、不加以割碎、不使之僵化，那么我们就不能想象、表达、测量、描述运动。”②

应该启发引导学生，使之认识到：若运用辩证的方法，抓住主要矛盾，抓住规律性知识后会收到事半功倍的效果。可将众多的无机化学反应按离子反应和氧化还原反应这两大类型来分类、归纳，从中找出规律就好办了。如离子反应能进行到底的，一般有三个条件。对氧化还原反应，首先要分清楚氧化剂是得电子的物质，一般是非金属，高价化合物；还原剂则是失电子的物质，一般是金属，低价化合物，反应类型可分三种。学生掌握了规律，就容易理解和记忆，进一步对于没有见到过的反应也会处理，即培养了举一反三的能力。

有些问题必须运用辩证思维才能圆满地作出解释。如在碳酸溶液中滴入浓的碳酸钠溶液，在氨水中滴入浓的氯化铵溶液，两者的化学平衡各向哪个方向移动的问题。因为碳酸钠水解显碱性，氯化铵水解显酸性，则氢离子和氢氧根结合成水，平衡向右移动。其实，对于碳酸是正确的，对氨水则相反，原因是氯化铵水解中铵离子远比水解后的氢离子多。铵离子的增多大大超过氢离子，主要作用的是铵离子，促使氨水的平衡向左移

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，190页。
② 列宁：《哲学笔记》，人民出版社，1974年，285页。

动。在碳酸钠溶液中，碳酸根比水解后的碳酸氢根和氢氧根多得多，主要作用的是碳酸根，碳酸根可以直接与碳酸反应生成碳酸氢根，氢氧根与氢离子结合成水，两者都促进平衡向右移动。学生有了一定逻辑思维能力后，就可以运用概念、判断、推理这把钥匙，比较方便地打开科学知识的大门。若进一步培养学生具有辩证思维能力，即使是初步的，也为今后的创造铺平了道路。

大力扶植教育事业的发展和提倡多层次地评奖及竞赛活动

（1）急需提高教师的地位。

人才出于教育，教育质量的高低由教师、学生、设备三个条件来决定。其中关键是教师，有了高质量的教师，才有高质量的学生，才会创建高质量的设备。因此，急需逐步提高教师的经济、社会等方面的地位，使优秀高中生乐意报考高等师范院校，同时发展各级师范教育，这是培养人才的关键。只有这样，才能使高质量的教师后继有人，大批涌现，教育事业得以健康、蓬勃发展。

（2）重视教育的智力投资。

我国教育经费在整个国民经济中所占的比重不够恰当，确是个长期没有解决的问题。如1971年我国仅占4.5%，而同年的日本占20.4%。近年来，中央正在重视教育方面的智力投资，列为三项战略目标之一，这是可喜的。然而在这有限的教育经费中，大部分用于高等和中等专业教育，对于普通中、小学的投资相对来说实在少得可怜。从全国经费看，1953年每个中学生平均112元，1958降为88.9元，1980年又降为60.1元。对中学的投资过少，致使多数学校因经费无着落不能开设实验课，长期的“在黑板上做实验”，怎么能引起学生的兴趣和提高化学教学的质量呢？1979年全国高考中的实验题，超出了死记硬背的规定范围，引起不少意见和责问。因为没有这些实验设备，连老师也没见过的仪器，怎么要求学生来回答。若学生长期不动手做实验，又怎么能提高中学化学教学的质量。这直接影响化学人才的成长。所以，务必要求较快地增加教育经费的比率，多给普通中学“雪中送炭”，增添必要的仪器、药品。让在中学化学课中，教师能全部完成课本上的演示实验和学生动手做完学生实验，才能培养出会动手实验和用脑思索的大批合格人才供高等学校择优录取，使化学科技人才辈出。

（3）提倡多层次的评奖及竞赛活动。

一年一度评选的诺贝尔奖，对整个世界科学的发展是起推动作用的。近年来，全国评选的自然科学奖，也促进了我国科学的繁荣。1983年中国化学会建立了“青年化学奖”，希望每年评奖一次，来吸引广大青年化学爱好者积极参加，促进我国化学科学的发展。另外，还应开展中学化学竞赛等活动，如同中学数学和作文比赛等一样经常地开展起来。这将会推动青少年们对基础化学的重视，和培养对化学科学的浓厚兴趣，有利于将来涌现出众多的爱迪生和爱因斯坦式的化学科技人才。

岑 士 祷

6.“两栖化学家”的独特作用

在人类文明史上，由不同行业的工匠们保持的技术传统，曾一度与祭司、书吏和哲

学家们保持的精神传统相分离。后来，这两种传统才结合起来，产生了科学的传统①。但在科学内部，却有基础科学与应用科学之分，因而有一些科学家主要从事基础研究，另外一些科学家则主要从事应用研究。从事基础研究的科学家虽然也进行实验研究，但他们的直接目的却是发现新的现象、属性和规律，以认识自然。而从事应用研究的科学家尽管也进行理论探索，但他们的直接目的却是发明新产品、新工艺、新流程，以改造自然。

化学与其它学科一样，也有基础与应用之分。所不同的是，化学是研究原子、分子层次上的物质的提取、制备、组成、结构、性质、变化及有关的现象和规律的一门科学，其研究对象涉及到人类生活的各个方面。这样，它的许多成果，如新物质、新性能、新反应的发现，不仅标志着人们对于自然的新认识，而且一经推广应用，又可以直接在生产和生活中收到效益。这一特点，使化学与国民经济和社会生产的各个部门发生了广泛而密切的联系。也正是这种特点，使化学界不仅有分别从事基础研究和应用研究的学者，而且还有既进行基础研究又进行应用研究，或者既从事化学研究又经营化学企业的化学家。这后一类化学家，善于把基础研究与应用研究结合起来，善于把科研成果迅速应用于工农业生产，是在两个领域里活动的“两栖化学家”。

考察一下化学史，我们可以发现，无论是近代还是现代，历来不乏这类两栖化学家。李比希既在有机化学的“原始森林”中开辟道路，又为农业化学和生理化学奠基。柏琴不仅在有机合成领域中做出贡献，而且首创了合成染料的新工业部门。诺贝尔既是研制烈性炸药的化学家，又是经营化学工业的实业家。卡罗瑟斯不仅在缩聚反应的历程和规律的研究上独树一帜，而且在合成纤维的工业生产上做了开创性的工作。齐格勒和纳塔既在有机合成和催化研究上大显身手，又在石油化工的发展上创造过奇迹……。两栖化学家在生产、经济、社会和科学的发展中具有独特的作用，他们的影响远远超出了他们的活动领域。

对科学转化为生产力的催化作用

基础研究所要解决的是自然界的客观事物“是什么”和“为什么如此”的问题。不言而喻，对自然事物的认识和理解，是利用、改造和征服自然的前提。认识自然为变革自然提供理性武器。所以，基础研究的成果是一种间接的、潜在的、“知识底形态”上的生产力②。这种潜在的生产力只有在并入生产过程时，才能转化成为直接的生产力。只有经过应用科学研究这个中间媒介，基础研究的成果才能被用于改造自然的生产活动。

基础研究成果经应用研究而到生产应用这一过程的完成，可以有不同的方式。它可以由基础科学家、应用科学家和生产者以“接力”的方式完成，也可以由两栖学者“跑全程”完成。大家都知道，反映基础研究成果的论文，一般只报道主要结果和主要方法，而对于如何取得该项成果的细节和思路并不作具体叙述。多数情况下，基础研究的成果也不可能直接放大到生产规模。实验室里得到的成果还必须经过小规模的中间试验

① 斯蒂芬·F·梅森，《自然科学史》，上海人民出版社，1977年，1—2页。

② 马克思，《政治经济学批判大纲（草稿）》（第3分册），人民出版社，1963年，350页。

才允许投入生产。具体细节对于一项科研成果的推广应用是十分重要的。显然，在“接力”方式中，应用科学家必须重复那些未经报道的具体细节方面的研究工作。而能够“跑全程”的科学家，却常可减少或不必进行这种重复研究，可以较大的步子，更快的速度把自己的成果推广进入生产领域。这样，两栖学者就降低了潜在生产力向直接生产力转化的“活化能”，在这种转化过程中起着催化作用。

有一些两栖化学家，往往善于围绕社会的需要来选择基础研究课题。而他们在从事基础研究的同时，又密切关注着所进行的研究在近期应用的可能性，一旦发现其中的使用价值，便马上倾注全部精力来推广和应用自己的成果。柏琴在皇家化学学院读书时，在杰出的化学家霍夫曼亲自指导下从事有机合成的基础研究，合成了萘胺。后来，他想要制取能够直接满足人们需要的化合物，于是选择了从煤焦油中制取奎宁的课题。柏琴虽然没有制成奎宁，但却无意中合成了苯胺紫，发现这是一种实用价值很大的染料。第二年，他果敢地离开学校，去开办合成苯胺紫的染料工厂。当时，柏琴年仅十八岁，而且从未见过什么化工厂，霍夫曼等人为了他的前途曾力劝他放弃这种冒险计划①。然而，富有胆识、勇于进取的柏琴，仅仅用了一年时间，便建成了工厂，开创了以煤焦油为基础的一个近代有机合成化学工业生产部门。

格雷贝和里伯曼看到十九世纪欧洲纺织工业的蓬勃发展，引起了天然茜素染料的严重不足，于是在研究有机化合物的结构与合成时，毅然选择了茜素作为自己的研究对象。他们弄清了茜素的结构，制得了茜素，第一次用人工方法合成了天然染料，在基础研究上取得一个突破。接着，他们马上转向实用研究，与巴登工厂的卡罗合作，发现了适于工业生产的新合成方法。不久，市场上的天然茜素便被合成茜素取而代之②。马克思曾从经济学的角度谈到这个问题，他说：“由煤焦油提炼茜素或茜红染料的方法，利用现有的生产煤焦油染料的设备，已经可以在几周之内，得到以前需要几年才能得到的结果。茜素生长需要一年，然而还需要让茜根长几年，等茜根成熟，才能制成染料。”③

柏琴的退学，格雷贝与里伯曼的转向，都使他们的基础研究成果很快得到推广，迅速转化成为直接的生产力。

还有一些两栖化学家，直接从科学发展和生产需要的结合上确定研究方向，同时从事基础理论研究和工业应用研究。他们所取得的成就，既有一定的科学意义，又有重要的生产价值。

催化作用是具有战略意义的现代化学研究方向之一，同时又是发展现代化学工业的关键。齐格勒和纳塔正是在这个方向上选择课题进行研究，既发现了新的催化反应，又发明了新的催化剂。他们的工作，丰富了人们对于催化和有机反应方面的认识，同时促进了现代石油化学工业和有机合成工业的发展。正因为如此，人们把齐格勒所走的基础理论研究和工业应用研究相结合的道路，誉为“米海姆化学之路”（米海姆为齐格勒工作的城市）。米海姆化学之路，就是以最快的速度、最短的路程把知识形态的生产力转化为直接生产力的道路。

---

① 丁绪贤：《化学史通考》（下册），商务印书馆，1951年，632页。

② 《化学发展简史》编写组：《化学发展简史》，科学出版社，1980年，185—186页。

③ 马克思：《资本论》第3卷，人民出版社，1975年，85页。

对社会经济发展的加速作用

科学用于生产，潜在的生产力转化成为直接的生产力，同时也就是精神形态的财富变为物质形态的财富的过程。进入资本主义社会后，"生产过程成了科学的应用，而科学反过来成了生产过程的因素即所谓职能。"所以说，"科学获得的使命是：成为生产财富的手段，成为致富的手段。"① 由于两栖化学家善于把基础研究和应用研究结合起来，或者把化学研究与企业经营管理结合起来，能够很快地推广应用化学研究的成果，满足人们一定的生活需要，所以也就能够使相应的生产部门经营有术、生财有道，很快地收到经济效益，从而也就加速了社会经济的发展。

马克思说："化学的每一个进步不仅增加有用物质的数量和已知物质的用途，从而随着资本的增长扩大投资领域。同时，它还教人们把生产过程和消费过程中的废料投回到再生产过程的循环中去，从而无需预先支出资本，就能创造新的资本材料。"②不少两栖化学家善于研究那些生产者不知其性质、学者不知其用途的"废物"，使化学工业"不仅发现新的方法来利用本工业的废料，而且还利用其他工业的各种各样的废料。例如，把以前几乎毫无用处的煤焦油，变为苯胺染料，茜红染料（茜素），近代甚至把它变成药品。"③ 当初，蒽原是煤焦油中的副产品，每吨不过几先令。但自格雷贝和里伯曼合成茜素后，蒽作为重要的工业原料，每吨竟涨价到一百镑④。

李比希除在有机化学的"原始森林"里带领他的学生们开辟道路外，也从化学角度研究农业，研究动物的生理作用和营养问题。当他游历美洲，看到把化学研究成果变为工业生产有着巨大潜力和广阔前途之后，毅然放弃了化学基础理论研究世界权威的荣誉，转向研究应用化学，开发化学工业的生产领域。他先后创办了化肥公司及"肉精"、婴儿代食品等等企业。那时南美洲和澳大利亚仅仅为了取皮和脂肪，每年就要屠宰大批的牛，而白白浪费大量牛肉。李比希把牛肉加工成较有营养的所谓"李比希肉精"，变废为宝，创造了不少财富。

"李比希也曾述说英国的化学工厂主对化学惊人地无知。"⑤ 象李比希这样有远见的两栖化学家，不仅科研有方，而且经营有术。他们经营管理的化工企业，大都具有产品新、质量高和经济效益良好的特点。柏琴后来办的茜素工厂，1869年的产量只有一吨，次年便增至四十吨，到第三年已达二百二十吨。直到1873年德国开始工业生产合成染料为止，柏琴的工厂"简直操世界染料市场之牛耳"⑥。

二十世纪以来，一些有远见的化工企业的经营者，也很注重招聘一些两栖化学家作为学术带头人，让他们领导和参与基础与应用的结合研究。第一次世界大战后，欧美各国市场上丝织品相当紧张。美国的杜邦公司1927年就决心研制合成纤维。1928年他们聘请卡罗瑟斯担任公司的有机化学研究小组组长，负责领导聚合反应的基础研究和合成

---

① 马克思：《机器。自然力和科学的应用》，人民出版社，1978年，206页。
② 马克思：《资本论》第1卷，人民出版社，1975年，664页。
③ 马克思：《资本论》第3卷，人民出版社，1975年，118页。
④ 丁绪贤：《化学史通考》（下册），商务印书馆，1951年，534页。
⑤ 同②，424页。
⑥ 同④，532页。

纤维的实用研究。为这项研究，杜邦公司大约投资二千七百万美元①。卡罗瑟斯在缩聚反应理论及反应历程，尼龙的研制及工业生产方面，都取得重大成就。尼龙产品投放市场后，大受消费者的欢迎。以后，在二次大战期间，其它纤维纺织品的销售量一度锐减，而尼龙织品市场却一直保持兴旺②。杜邦公司因此而发了大财，美国的有机化学工业从此有了新的良好开端。

实际上，两栖化学家对社会经济的发展作出的独特贡献，并不仅限于这个方面。他们的成就，对于社会经济还有理论上更为深刻和持久的影响。

近代自然科学产生时期，不少从事基础研究的科学家，如哥白尼、塞尔维特、布鲁诺、伽利略等人的学说，由于触犯了反动阶级的利益曾遭到强烈反对。后来，基础研究的成果直接触犯人们切身利益的情况是越来越少了，但应用研究的成果却一直紧密联系着人们的切身利益。可以说，基础研究对于社会的意义较为深刻，而应用研究对于人类的意义则较为直接。所以，基础研究的成果往往为进步哲学提供根据，而应用研究的成果则为革命的政治学说提供根据。两栖化学家从基础和应用、科学与生产的结合上进行研究，他们的成就往往为革命的社会政治学说提供既深刻又直接的根据。

李比希不仅在基础研究中探索纯自然关系问题，而且在应用研究中也关心人与自然的关系问题。马克思和恩格斯在他们的著作或通信中，提到李比希或引用李比希著作的地方多达三十余处。尤其是在《资本论》这部伟大论著中，马克思非常重视李比希用化学观点研究农业和人的营养生理所取得的成果。马克思引用了李比希著作中指出的南美洲的雇主把矿工“当作牛马，强迫他们吃豆子；豆子含磷酸钙比面包多得多”的材料③，引用了李比希关于“人的发育由于自然条件或社会条件而受到妨害，人体就会缩小”的材料④。马克思认为，“李比希的不朽功绩之一，是从自然科学的观点出发阐明了现代农业的消极方面。”⑤马克思在谈到对地租理论进行探讨的问题时指出：“德国的新农业化学，特别是李比希和申拜因，对这件事情比所有经济学家加起来还更重要”⑥。李比希把基础研究和应用研究结合起来所取得的成就，客观上为马克思的经济学说提供了部分深刻、具体的论据。显然，李比希的这些成就，经马克思引用、阐发后，对于从理论上武装人类最进步的阶级，从根本上推动经济社会的发展，是有积极意义的。

对基础研究的反馈作用

两栖化学家在两个领域里从事工作，注重基础研究成果的应用和推广，这看起来似乎会削弱基础研究。实际上，两栖化学家的工作促进了生产力和社会的发展，而生产力和社会的发展反过来必然会加强基础研究。

首先，两栖化学家在应用研究和工业生产的领域里，视野开阔，只要目光敏锐，常

---

① 申漳：《简明科学技术史话》，中国青年出社版，1981年，361页。
② 参见《自然杂志》1982年第4期，290页成晓旭、杨浩之的文章。
③ 马克思：《资本论》第1卷，人民出版社，1975年，628页。
④ 同③，117—118页。
⑤ 同③，553页。
⑥ 《马克思恩格斯全集》第31卷，人民出版社，1972年，181页。

常可以观察到新事实和新现象。这些新事实和新现象可以向基础研究提出新的课题，从而也就会促进纯化学的发展。

十九世纪末，德国涌现了一批又一批的两栖化学家。许多年轻有为的化学博士到新兴的化工企业谋职，同时，培养出这些化学博士的教授们也纷纷被聘为化工企业的顾问。他们不仅指导化工厂沿着科学的方向发展，而且还把工业生产中遇到的问题带回实验室去，训练学生。他们在工业实验室里看到的数目不断增多的半成品，也就是合成某些新化合物的中间体。他们在大学实验室里对这些中间体进行研究，往往就是发现新合成方法的起点①。

其次，两栖化学家的工作促进了经济效益的提高，推动了经济的发展，基础研究就会得到经济的有力支持。

柏琴把他的基础研究成果成功地用于生产后不久，就将他的工厂卖掉，将住宅改为实验室，又转而专门从事基础研究，很快就在有机合成方面取得新成就，发现了以他的名字命名的芳醛类和脂肪酸酐在碱存在下缩合生成α、β不饱和酸类的反应（柏琴反应），并且在物理有机化学的新领域里开展了工作②。

诺贝尔既重视基础理论，又重视实用研究。他既是化学家，又是实业家。他在炸药、合成橡胶、人造革和硝化纤维方面取得许多重要成果，获得了三百五十五项专利权，又在二十多个国家开办了八十多个企业。这些企业大量推广应用了他的研究成果，并为他的化学研究提供了经济上的可靠保证。根据他的遗愿设立的诺贝尔奖金，促进了化学的基础研究，也对物理学、生物学和医学的基础研究起到一定的促进作用。

再次，两栖化学家把化学的基础研究成果与人们的利益联系起来，以最快的速度把基础研究成果用于生产，使社会加深了对他们本人的工作和化学研究事业意义的了解和认识，在为他们本人和化学学科赢得巨大社会声誉的同时，也使化学研究得到更加广泛的社会支持。

李比希和他的学生们，把化学基础研究和应用研究结合起来，给德国带来了不少利益，特别是使德国的化学工业广开财源，在世界上独步一时。这样一来，德国全社会都开始重视化学的基础研究。结果，十九世纪末和二十世纪初，使德国在化学基础研究上也一度称雄全球。同样是受两栖化学家的影响，许多现代大型化工企业，例如前面提到的杜邦公司，都在重视生产管理和应用研究的同时，常常还投入大量资金开展基础研究。此外，许多两栖化学家由于在学术界和生产部门都有影响，他们在学术团体和社会政治两方面，都享有较多的荣誉和较高的地位，这在客观上也提高了化学学科的社会地位。

当代化学与现代科学技术的其它部门一样，分化、渗透和杂交趋势日益加剧，在学科的边缘处成长起许多新的尖端学科与技术。有不少崭新的领域和基础研究，需要耗用大量的资金、设备和人力，在其研究的过程中一时也极难看到它们的直接用处。这虽是社会与科研分工的必然现象，但如长期得不到社会的承认与支持，有时也不免会把基础研究、尖端探索引入困境。如果能有一批训练有素、思路敏捷的两栖化学家参与其事，

---

① 〔美〕亨利·M.莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，241页。

② 丁绪贤：《化学史通考》（下册），商务印书馆，1951年，633页。

能及时抓住某些阶段性研究成果，加以扩展或转移，另辟蹊径、打开局面，开拓一些意想不到的应用研究及生产部门，将会收到具有突破性的社会效果。反过来，对供养和促进基础研究、尖端探索，也有极大裨益。这在氨基酸、核酸等研究领域已有先例，而在人工模拟生物固氮等领域的研究中，亦将如是。所以，在现代科学研究体系中，两栖化学家的作用仍然很重要。

两栖化学家的重要作用，给我们以不少有益的启示。

以煤焦油为原料、以人造染料为代表产品的十九世纪的有机化学工业，其奠基性的工作是柏琴、格雷贝和里伯曼等一批两栖化学家完成的。以石油和天然气为原料，以三大合成材料为代表产品的二十世纪的有机化学工业，其奠基性的工作和重大进展是与卡罗瑟斯、齐格勒和纳塔等两栖化学家分不开的。类似地，十九世纪末和二十世纪初德国在化学化工上称雄世界，二十世纪三十年代以后美国在化学工业上进入世界先进行列，都与这两个国家的两栖化学家的重要工作分不开。此外，在半封建半殖民地的旧中国，化学与化工学科之所以还能有某些发展，这与两栖化学家的作用也颇有关联。如创立我国制碱工业的范旭东、侯德榜，以搞味精起家的吴蕴初（我国化学化工学界早有“南吴北范”的说法），他们在中国现代化学和化工史上都有重要贡献。当年中国的化学研究，学术活动的开展，学术团体的建立及学术书刊的出版，也与他们的支持和赞助分不开。旧中国的这一侧面的经验，对当前第三世界国家经济与科学的发展，应该说是有一定的借鉴作用的。

这些事实告诉我们，一个国家要在经济上进入世界先进国家的行列，就必须把化学学科的发展与经济建设结合起来。尤其重要的是，对于那些可能有重大经济效益和商业价值的化学、化工研究课题，除了要把从事基础研究和应用研究的化学家，以及化学工程人员和化学企业管理人员的力量组织起来之外，还应当注意培养一批两栖化学家，让他们在关键岗位上承担重任，充分发挥他们的聪明才智与作用。

当今之世，化学早已不再是少数几位杰出人物，单纯为了深入探索自然界奥秘的一所“精神游乐场”，它与社会和生产的联系越来越紧密。现代社会不仅需要大批的基础化学家，应用化学家和化学工业管理人员，而且需要越来越多的两栖化学家。一百多年前，李比希在从基础研究转向应用研究的时候曾经说过，“化学正在取得异常迅速的成就，而希望赶上它的化学家们则处于不断脱毛的状态。不适于飞翔的旧羽毛从翅膀上脱落下来，而代之以新生的羽毛，这样飞起来就更有力更轻快。”① 有高度社会责任感、有远见的化学家们，应当象李比希那样，“处于不断脱毛的状态”，投身到基础与应用研究相结合，学术研究与企业管理相结合的现实事业中去，为生产力、经济和化学本身的发展做出更大的贡献！

任定成　王玉生

7. 应当重视化学史和科学方法论的教育

人才是事业的基础，古往今来，概莫能外。化学这门基础学科自十九世纪下半叶开

① 转引自《反杜林论》注释15，人民出版社，1970年，351页。

始，曾有很长一段繁荣昌盛的时期。后来，由于物理学、数学等学科作出惊人的贡献，人们的注意力转向物理、数学等学科。同时，由于化学工业与其它工业的飞速发展，化学污染成为环境污染的重要因素，从而渐渐使人们对化学产生了一些偏见，不少青年学生对化学敬而远之。这样下去势将影响化学学科的发展。因此，重视培养化学人才，是一项紧迫的任务。

同时，还应看到，现代化学正处在急剧的变革中，化学为建立新的理论体系，正酝酿着一场新的革命，它将从描述性的科学向推理性科学过渡，从主要是定性科学向定量科学发展，从研究宏观结构理论向微观结构理论深入。一个比较完整的理论化、定量化、微观化的化学新体系正在迅速地建立起来。这就要求在培养化学人才时必须进一步注意知识的深度和必要的广度，使所培养的人才能借助其它学科的理论和研究手段来提高本专业水平，这是化学专业办出特色和具有水平的根本保证。

那么，采用何种方法与途径，能在尽可能短的周期内，造就一大批高水平的化学化工人才？以下两项措施应该引起社会和学校的重视。

严格而系统的方法论教育

化学科学本身充满了辩证法。化学人才也应该按辩证法的规律进行培养。目前我国各类学校培养出来的化学、化工人才，知识面较窄，思维不活跃，独立工作能力、创造性精神不很强。尽管不少人在校成绩很好，但多数是纯知识的积累，解决实际问题的能力差。也有一小部分学生成绩看来不高，但思想活跃，知识学得活，他们参加工作后，由于善于思考，勇于革新，创造性思维能力较强，工作效果反而好得多。这反映了我国教育上的某些弊端。因此，应采取有效措施改进现行的教育方法。

其中一项重要的措施是应对化学人才进行严格而系统的科学方法论教育。“一个民族要想站在科学的最高峰，就一刻也不能没有理论思维。”① 自觉地、正确地掌握和运用一系列的科学研究方法，可以少走弯路，更快地达到对自然规律的正确认识。科学实践表明，一些自然科学家之所以能够在科学上做出重大的贡献，除了当时的生产和科学实验条件外，还往往与他们运用了正确的科学研究方法密切相关。科学方法，是人们发现真理和改造自然的桥梁和手段。随着现代科学的迅猛发展和所谓“知识爆炸”的形势，有人预测未来的“文盲”，将不再是目不识丁的人，而是那些没有掌握科学方法和不善于解决问题的人。所以，在学校教学的各个环节，要注意培养学生正确地掌握经验方法。同时，注重理论思维对观察、实验方法的指导作用。

学生学习了观察与实验方法以后，才能正确地运用它，并会不失时机的抓住观察、实验中的机遇，突破科学研究中的难点。例如，在高中课本中有一个用铂丝作催化剂进行氨氧化的实验，按照所提供的资料操作，始终不能观察到红棕色的二氧化氮气体和铂丝继续保持红热的现象。为此，曾引起了长时间的争论。后来，一些学生在无数次的失败中，偶尔发现用预热容器作实验，上述的两个现象就会出现。他们不失时机地抓住这个机遇，总结出在做此实验时，先把容器烘干且不等其冷却，就拿去做实验，即可避免二氧化氮气体与冷器皿中的水蒸汽化合，达到较好的实验效果，并得到学术界的好评。

① 恩格斯，《自然辩证法》，人民出版社，1971年，29页。

又如，学生们在掌握了逻辑思维方法后，将归纳与演绎方法应用于有机化学的学习，就能迅速地把握有机物的结构与性能的规律；用比较和分类的方法，可以对一些化学理论知识系统化、条理化，有利于学习知识的加深、巩固。因此，不失时机地对在校学生有意识地进行方法论的指导，就好比是给了他们一把打开知识宝库的钥匙，可以在较短的时间内培养出一大批具有辩证思维、富有创造精神，年轻有为的化学人才。可见，从方法论的教育入手，开发人才，大力宣传，努力尝试，对我国化学事业的发展是十分有利的。

给人以智慧的化学史教学

任何一门科学，都有其发生和发展的过程，从而形成自身独有的规律。没有规律的知识是支离破碎的，学生在学习知识时，就会把它看成是“终极的真理”，死记硬背，不求甚解，盲目追求高分。一些所谓“高分低能”的学生，就是不会从所学知识中找出规律性的东西，无法从历史中寻求借签，形成必要的研究能力。所以，在培养化学人才时，还要重视化学史教学在化学教育中的作用。把化学史贯穿于化学教学过程中，使教学不只局限于现成知识本身的静态结论，还可以追溯到它的来源和动态演变，揭示出其中的科学思想和科学方法。使学生自觉地认识到，经过实践检验的定律、定义、既包含着正确的内容，而具有绝对的意义；但又不是永远不变的僵死教条，它也具有发展和相对的意义。这样就使学生能够从发展的高度去把握知识，培养他们的创造性和独立工作能力，很多发达国家十分重视科学史的教育，1960年，美国开始在一百多所学校进行HOSC教学法，即科学史教育方面的试验，取得了良好效果。日本政府决定，从1982年起在高中开设科学史的选修课。由此可以看出，在化学教育中重视化学史的传授，已成为化学教育发展的一种趋势，这应引起我们的重视。

化学史教育可以促进教学质量的提高，这是因为：

（1）能激发和吸引更多的青年人热爱化学，调动学生的学习积极性。

首先，化学史具体展示了化学的地位与作用。古往今来，人类的衣食住行离不开化学。自从人类学会使用和保存火，结束了茹毛饮血的生活后，随着制陶、冶金、造纸、瓷器、染料、玻璃等制造工艺的发展，人类社会才逐步地向着繁荣昌盛、文明进步的方向前进。从陶器、铜器、铁器、蒸汽、电气，直至原子能时代的到来，无一不与化学发展紧紧地联系在一起。

在人类不断地同饥饿、疾病作斗争中，化学也作出了不可磨灭的贡献。为了粮食增产，解决农业上所需氮肥的来源，二十世纪初，德国化工专家哈伯于1909年提出将大气中氮转化为氨的实用操作法，实现了合成氨工业化的生产，使合成氨迈出了实验室阶段，致使粮食得以增产。最近20年，世界粮食产量提高了一倍，其中30％是由于施肥的结果，而施用化肥又占施肥总量的一半。

当代人类面临的能源、材料、食物和环境问题中的任何一个问题，也都需要化学作出重要贡献。

其次，历史上优秀化学家们的杰出成就与思维方法给人以激励与启示。历史上有不少化学家与其他任何一门学科的佼佼者一样，因对人类作出贡献而载入光辉的史册。仅就本世纪开始颁发的诺贝尔奖来说，到1980年就有98人获得化学奖。介绍化学家的事迹

和成就，可以激励和鞭策青年一代为化学科学的发展而奋斗；能鼓励青年破除迷信，敢于创新。居里夫妇四年如一日地站在大铁锅旁一锅一锅地煮，一瓶一瓶地滤，一点一点地结晶，终于制得0.019克纯氧化镭，在周期表上增添了一个新元素镭。这本来可以作为他们家庭致富的资本，但他们却无私地把制镭方法公诸于世。诺贝尔为制造安全烈性炸药，付出过极大牺牲和代价。实验室多次被炸毁，实验人员的牺牲和受伤，从未动摇他的决心，最后竟至全身着火、血迹斑斑地从硝烟中跑出。但是，他终于成功了。他劳碌一生，临终时无私地把他的财富献给了科学，献给了人类。像这样一些专心致志于科学发明和创造的学者，他们置生死于度外的献身精神，可以激励青年学生勇敢地去攀登科学高峰，为崇高的目标探求真理，为造福人类献身。

（2）使学生的认识过程，符合辩证思维，从而深刻地、全面地掌握知识。化学学科在其迂回曲折的发展历史中，充满着矛盾和争论。在传授知识时，适时的利用正反面知识的衬托与对照，形成认识上的矛盾和冲突；特别是对重要的化学基础知识产生的原因、形成经过及发展趋势加以分析，并且深刻阐发继承与创新的关系，这样所学到知识就不是孤立、枯燥乏味的，而是生动、易懂、易记的东西。有的学生反映，化学这门学科犹如一棵大树，各分支学科是枝叶，而化学史则如树干，它把各分支学科有机地联系在一起，使人们能从总体上把握化学这门学科。

总之，学习化学史"不仅可以学到作为知识活动结果的知识结论，而且可以学到反映在认识活动过程中的研究方法，从而学到运用知识和发展知识的方法。"[①] 学习化学史上的重要成果及其研究过程和方法，正是加深理解自然科学方法论的具体措施，是在理论和实践上进一步掌握它的途径。并使学生能更准确地找到解决化学问题的办法，可以更深刻地了解化学家是怎样发现问题、分析问题、解决问题的，从而使学生独立研究的能力得到提高。

周 秋 豪

8.中等化学教学中的若干辩证法问题

我国唐代的韩愈（768—824年）在《师说》中把教师的职责归纳为传道、授业、解惑。一千多年来基本上如此。近年来，提出教师应该交给学生打开知识宝库的金钥匙，这比以前的要求更高了，因为目前是处在知识爆炸和知识老化（即陈旧）加速的时代。知识的增长正以指数的方式在膨胀，而知识老化的周期在逐渐缩短。中学化学教学如何适应这种急剧变化着的状况，这是一个值得探讨的课题。就中学化学教材内容来说，1979年新编的中学化学教材与旧教材（1965年）相比，内容大约增加了三分之一，并把原来大学的无机、有机、分析、物化、结构等一部分教材下放到中学，有不少内容在十年前的大学毕业生也没有学过。面对这些现实问题，化学教学上应该怎么办？袭用老师"灌"和学生"记"的方法只能穷于应付而不能真正解决问题。只有把教学重点移到培养学生的能力上，重视智力的开发才能跟上时代的要求。正如教会学生掌握知识上的"点金术"总比单纯地赐给学生一些"碎金子"要好得多。以下尝试论述中学化学教学

---

① 龚育之：《关于自然科学发展规律的几个问题》，上海人民出版社，1978年，94页。

中如何培养学生能力的若干辩证关系。

教　与　学

有人认为教师的教在教学过程中始终是矛盾的主要方面，甚至把学生成绩的好坏作为衡量教师水平高低的唯一标准，这是不够全面的。教和学是一对矛盾，一成不变的矛盾是不存在的，在教和学中，谁是矛盾的主要方面也是随着学生年龄的增长和知识积累的程度而发生变化的。譬如在启蒙阶段，无疑的，教师的教是矛盾的主要方面，但到了高年级，学生的学便成了矛盾的主要方面。然而，在教和学的双边活动中，即使在低年级，也应重视能力的培养。如化学课起始于初中三年级，第一堂课要从演示镁的燃烧等实验来引入“化学变化”这个重要的概念。学生对看实验的兴趣很高，但各个学生由于个人的爱好、志趣不同，从不同角度去观察和理解实验，所得的结论也不尽相同。为了达到不同的教学目的，每个实验在不同的阶段也应有不同的要求，如这个实验要事先引导学生观察反应前后物质性质的不同和伴随反应而同时发生的放热、发光等现象，这次是培养学生在这一方面的观察能力。以后，镁在二氧化碳中燃烧则主要观察产物并进一步验证是什么？当然，观察能力的培养不可能通过一次就行，要分阶段地逐步训练。总之，起始年级要以教师的讲为主，然而到了高年级时，学生对知识的掌握和巩固，主要靠学生用科学方法和理论思维，通过自学来获得，也就是以学生的学为主了。但是学生的观察、自学能力，要由教师结合教材有计划地给予培养。所以，教师本人要具有用科学方法和理论思维等能力来处理教材的高超技巧，教会学生懂得一些方法后，就让学生独立运用并有所创新，教师再加以归纳、提高和指导，使学生能力提高得快一些。如化学上书写离子反应式及其配平的方法，在“凡溶于水的强电解质写离子形式”这句话中，分析出具有强电解质和易溶解的两个条件同时存在的物质才可写离子。强电解质是强酸、强碱和盐，强酸、强碱都溶，可以写离子；对于盐类，要考虑盐的溶解度，应记住钾、钠、铵、硝酸盐等都溶，才能写离子。不溶的或弱电解质都要写分子。配平方法先让学生练习，从中师生共同归纳出方法，关键是掌握反应前后电荷总数要相等这个规律。

讲　和　练

教师的讲和学生的练也是一对矛盾，要求老师精讲是应该的，但要求学生多做书面作业不一定合适。学生做练习固然对学习有利，但所用的时间太多就要走向反面。当前，由于种种原因，作业繁多，造成学生负担过重，冲击了能力的培养。但也不是说练习做的越少越好，应该是适中。所以，要提倡精讲巧炼。巧炼，必须紧扣大纲和教材，同时注意三点：（1）练的方式要多样化。如判断、选择、检验、填空、问答、改错、计算、推理等等。（2）练习题必须精选，使题目类型多一些，同类型的题目少一些，切忌“多多益善”。（3）有些练习不一定都用大量时间。如化学上对“电子云”这个概念，与其让学生照课文抄一遍，倒不如让学生用少量时间看一下书，用脑思索、想象会更有益。

总之，老师要慎重严格地挑选习题，把精选习题作为备课的主要内容之一。只有将学生从重复、单调、偏难的“题海战术”中解放出来，才能让学生有时间主动、活泼地自学一些个人喜爱的知识，发展个人的智力。正如著名的科学家卢瑟福所主张的那样：

应该用更多的时间去想，而用较少的时间去做。

进　和　退

人们一般认为进总是好的，而且进的越快越好；对于退是为了进，有退才有进的认识是不足的。在教学中用后退来保证前进的例子是屡见不鲜的。如一个单元或一章后的复习课，对新授课来说是后退，但只有上好复习课，巩固这一单元或这一章的基础知识以后，再讲新知识时，学生接受的效果会更好，进度也可以快一点。就是在一堂课中，常采用旧知识来导人新课，即所谓“温故而知新”。每讲完一个概念后也可有停顿，让学生思考，课后做好练习等等。高中的总复习是大踏步的后退到初中“双基”内容才开始的。以上几种后退，对于学生获得知识，培养能力是完全必要的。那么，后退到哪里才算合适呢？应该退到“双基”内容后再前进，效果会更好。关于中学化学的“双基”内容，扼要地说可分为五个方面：（1）基本概念和基本理论。以物质结构为主线来讲清概念和研究元素周期表、化学平衡、电离学说等。（2）元素及其化合物。典型的是氢、氧、氯、硫、氮、碳、铝、镁、钠、铁、铜等十一种单质及化合物的性质、制法和用途。（3）有机化学。典型的是甲烷、乙烯、苯、乙醇、乙醛、乙酸等为主。抓住结构特点（单键、双键、苯环和羟基、羧基、氨基等官能团），推出化学性质、用途以及制法。（4）实验。重视基本操作和原理，如10种气体的制取和收集、物质的检验和证明、配制浓度、中和滴定等都应注重原理，还要求学会基本操作、设计简单实验和写出实验报告。（5）计算。包括分子式、反应式、溶液浓度和溶解度等三个方面，重点是对综合计算、推理等题的分析和解决问题能力的培养。

总之，中学阶段对“进”的要求不能过高，但要达到灵活掌握中学化学的“双基”，并能举一反三。这种能力的培养必须有进有退，多次反复后才能达到。

多　和　少

数学家华罗庚认为学习的方法是从薄到厚，再从厚到薄；艺术家梅兰芳总结舞台经验是经历了从少到多，再由多到少的过程。这两位大师各自从切身感受来谈的方法正是不谋而合。说明学生要获得知识或教师要教会学生，应体现少——多——少的过程，这是符合认识论的规律的。因为重要的是在该过程中实现了两个飞跃。如初中学生对化学从一无所知到跨人化学科学大门，是很重要的第一次飞跃，所以对初三化学开始一章的教学要特别重视，共14课时除要讲清28个概念外，还有空气、惰性气体和氧气的性质、制法、用途，分子式和化学方程式的写法和分子式的计算等等。若不分主次的平均用力，势必造成每堂课的内容太多，多了反而使学生消化不了。不如少一点，使学生学得好一点；开始慢一点，以后才可以快一点。这章的重点，在宏观上是物理、化学两种变化，在微观上是分子、原子两个概念。这两种变化和两个概念，与上述内容比较显然是少得多，但学生牢固掌握了（第一飞跃），可以进一步地理解许多现象和概念，这种能力的培养可以说是第二次飞跃。实现第二次飞跃比第一次飞跃更困难一些，然而也更重要。教师要从学生已有的知识出发，举一些实例来启发他们的思考，通过演示实验等引导学生思索。同时，应在每一个概念前多给学生一些具体的感性知识，便于学生更好地理解概念。总之，对每个概念的树立也应经历由多到少的一次飞跃，一个概念犹如一

块奠基石，只有在每块基石上狠下一番功夫，才能建成高耸的化学大厦。

一个中学生要求记住二百多个无机化学的反应式，若一个一个的死记硬背，确实有困难；就是勉强记住，对今后的学习和工作的用处也将是寥寥。一般的学生，对繁多的化学方程式感到难于记忆与判断，原因是缺乏具体指导好第二次飞跃，即由多到少的转化。若老师指导学生将纷乱的化学反应进行科学的分类，就会收到好的效果。如初中化学的反应类型，主要分为化合、分解、置换、复分解四类。其中尤以化合、分解为主，则可简化为两种类型。因为从化合、分解可以进一步理解置换和复分解。置换可以理解为先将化合物分解成原子后再与单质的原子化合，关键是金属、非金属的单质原子必须比化合物中的金属、非金属原子活动；复分解可以理解为先分解再重新化合，其中反应条件很重要，凡生成物之一是沉淀或气体和难电离的水等的就能反应，否则就不反应。到了高中，需要按氧化还原反应和非氧化还原反应来分类。重点是氧化还原反应和离子反应。要掌握还原剂是失电子物质，本身被氧化；反之，为氧化剂。当然，总结出这些规律，先要由少到多的积累大批化学方程式，当积累达到一定数量后，应由教师帮助学生找出规律，并指导学生运用这个规律去认识还未见过面的一些氧化还原反应，即由多到少的转化。这一步的过渡较难，教师要花费更大的精力去培养学生实现这第二次飞跃。

总之，少——多——少的转化，关键是两次飞跃，首先教师自身要搞好，才能指导学生。还有，当前的复习资料和练习题那么多，若让学生自己去挑选和漫无边际的涉猎，一是时间不够二是学生识别能力低，对粗制滥造的资料和习题一时分不清，做了反受其害。因此，教师应将各种资料、习题作一番鉴别和筛选，按学生水平逐步地传授给学生，也就是教师翻阅的资料和习题要多一点，学生学习的资料和题目要少一些，这样才会收到事半功倍的效果。

理　论　和　实　验

化学虽然是以实验为基础的科学，但若只罗列一系列实验是不能成为科学的，必须有理论指导。所以，要将实验结果上升到理论，或在理论指导下进行实验，才会有好的效果。理论阐述中若脱离了实验，就成为空中楼阁，影响对理论的掌握。因此，理论和实验中都要重视互相渗透。但目前的教材中往往脱节，教师应根据情况作适当补充，使知识更加丰富，易于学生接受和得到启发。这样，在培养学生能力和发展智力上大有裨益。当前，不少学校固然因为缺乏仪器设备而不能实验，就是有条件的，也不太重视在实验过程中启发学生的积极思维，只按课本上写的做一下。严格地说，这也是一种浪费，因为没有发挥实验的真正作用。至于对学生实验习题，事先应让学生独立思考设计，由教师指名规定完成某个试验，并在教师严密注视下操作，发现错误，让学生更正后再做，当场评分。这样，学生动手的实验虽少，但培养了学生独立思考和设计能力以及独立操作技能，这比泛泛地做一些实验的效果更好。

理论的讲述中也要叙述介绍一些富有启发性的实验和发展的历史，使学生理解抽象的概念及理论更好一些。如高一化学讲电子排布时，可扼要地介绍1897年汤姆逊提出的“葡萄干面包”模型，1911年卢瑟福的行星式原子模型，1913年玻尔建立的量子化的原子模型，和1926年薛定锷等人在波粒二象性基础上提出电子运动的物质波概念与波动方程。

教学实践证明，结合教材讲一点有关人们从事化学实验活动与化学理论研究的史实，不但使学生对抽象的概念与理论能接受得更好，而且从中可以了解一些搞科学研究的方法，在发展青少年智力上是有益的。

思索和做题

有人认为对知识的掌握，文科的要求背诵，理科的是做大量的作业。若发现学生抬着头思索或边踱步边议论等，便斥之为“不务正业”。这是一种偏见。在中学化学教学过程亦应该消除这种偏见。其实，思索与做题都是为了理解和运用化学知识所采取的不同方法。做题前努力思索，做题时才准确和快速；做的习题是表示了学生的思路，两者是相互促进的。但目前不少教师规定，以完成多少作业来强迫学生学习该门功课，把学生在做题前的思索时间也挤没有了，结果是作业潦草、质量不佳，达不到理解和巩固知识的目的。所以，在目前，背诵和做题固然不可少，但思索尤为重要。特别在讲完重点内容后留下几分钟让学生思考，鼓励他们向老师提出问题更为重要。凡是化学新概念集中的章节更应注意复习，让学生从回顾旧概念中来思索和接受新概念。

因为时间是有限的，题目是无限的，所以，对化学作业题要挑选不同的思路（类型），同类型题的数量要少而精的几个。事实告诉我们，强迫学生多做重复的化学习题收获不大；有的典型题让学生用几种方法来解收获倒也不少。对学生的书面作业和测验都要认真批改和组织评讲，不是简单地说这样答是错的，而要指出错的原因；同时，不要单纯讲标准答案，而要讲解题的思路和技巧。这样，学生做的书面作业减少，思索的时间增多，重点才能真正转移到学生能力的培养上。

记忆和遗忘

知识是无限的，记忆作为大脑的一种能力是有限的。据说，一个人的一生中约存储一千万亿条信息，所以要求学生任何知识都记住是不可能的，而且也没有必要。在学习过程中遗忘是难免的，有些遗忘是必要的。对于化学知识的掌握亦应如此。作为教师，不仅要求学生善于筛选重点来记，也要教他们善于遗忘某些知识，不会遗忘也就不会记忆。所以，要训练学生善于选择那些非记不可的化学内容，又善于舍弃那些不必记的内容。例如，对于化学变化和物理变化的判断，若一个一个地独立地去记忆例子，会使脑子僵化，暂时记住了，遇到新的事例又不会判断了。如果遗忘一些具体例子，只要记住“变化时物质是否变化”这一条就行。唯有善于自觉地把某些内容摈之脑外，才能保证那些该记住的内容存之脑内。因为，在一定条件下，只有遗忘了次要的、才有助于记忆主要的。对于重要的化学知识，要通过学生自己艰苦用脑多思考。因为只有自己省悟出来或与同学们争论后得到的知识，印象才能深刻并掌握的牢固。反之，一学就会，一丢也就忘了。所以，在教师指导下，学生个人归纳、总结获得的知识其效果就好。如对有机化学的反应式不易记忆，教师可提示学生：若是单键（σ键）的易发生取代反应；双键、三键（π键）的发生加成反应。又若以取代、加成类型来理解其它反应就比较容易，如卤化、硝化、磺化、酯化、水解等反应是属于取代反应，加氢的还原反应和加氧的氧化反应属于加成反应，加聚反应是本身的加成反应，缩聚反应是取代和加成的一种综合等。让学生在默写各个反应式时比较反应的结构特点，这样就理解得深，记忆得牢。

个　性　和　共　性

教师的责任是为提高全体学生的科学文化水平而奋斗，既要照顾全班学生接受知识的情况，注意共性，也要注意培养学习尖子，不能搞“平而不尖”。要在互相兼顾中“因材施教”，使这些尖子能够较快地掌握获得知识的科学方法和理论思维的能力，在短时间内猎取“双基”知识而显出才华。为此，应该大力提倡成立课外活动小组，在自愿报名的学生中挑选出爱好化学而其它方面表现中等的学生组织起来，人员不要固定，发现优秀的可以参加，个别差的可以退出，人员的流动可使化学课外活动小组更朝气蓬勃。活动内容应尽可能是多方面的，如给他们介绍、讲解新知识，指导阅读中级化学科普读物等来开阔眼界；指导他们投身化学实验来获得丰富、生动的知识。也可以让学生写文章出刊，搞小型的简单的调查；运用知识为农村或小工厂解决一些简单的化学化工问题和搞些小创造、小发明。也可以发动学生在家庭里独立地搞些化学小实验等等。这些多样化活动，能进一步激发青少年的兴趣。总之，要处理好共性和个性的关系，为全面丰收和培养化学尖子作出贡献。

教学中也要注重与处理好通性和特性的关系。通性即共性，是从具体事物的个性中归纳出来的。如酸的化学通性是从盐酸、硫酸、硝酸、磷酸等个性中概括出来的。该通性则与酸能电离出来的阳离子仅为氢离子密切相关；但每种酸的酸根不同，故各自还具有不同的特性亦即个性的表现。

严　谨　和　浪　漫

好的化学教师在课堂上讲课是那么的自由，毫无枯燥乏味之感，所举的例子是那么的切题，引起学生的共鸣；又似乎信手拈来，极其自然，博得学生的赞赏。殊不知，这样的老师在课前是付出大量艰苦的劳动，有时为了要言之有据化学例证翔实而去翻阅众多资料；还要根据学生水平在几个例子中进行筛选，选择切题而又符合化学教学原则的才能用上等等。所以，只有课前严谨的备课，才能换来课堂上生动讲课的自由。这与不负责，不认真备课而信口开河的教师显然不是一回事。这种自由来自严谨，这是作为教师的基本要求。若教师讲完“双基”内容后，结合化学教材再讲得生动活泼些，甚至浪漫一点也未尝不可。这样反而更能激发青少年的求知欲望，将会收到意想不到的丰硕成果。在平时，教师要象海绵吸水似的博览群书，开阔思路，这样用时脑海里就会涌现出不少例子，象吸饱了水的海绵，用手一捏，随时会挤出水来一样。特别是目前处在化学与各学科互相渗透的时代，更应知识面广一些，借以活跃思路和提供科学方法的启示；并有利于本专业知识的提高。对待学生的兴趣和爱好要扬长避短，让他们自由地发展为好，不要搞“围追堵截”。要提倡教师在讲课中浪漫一些，但在浪漫中不要庸俗化，应使学生在思想上得到启迪。

岑　士　楷

（三）化学化工教育的结构和改革

探讨高等化学化工教育的结构和改革，在我国具有现实意义，这是人们很关注的一

个课题。但目前，从理论上加以深入研究与全面阐发，总的说来还不太成熟，有待于不断实践，总结经验。以下所论述的内容和观点，仅是一种学术性的见解，以期引起讨论。

1. 高等化学化工教育的改革

随着我国化学工业的迅速发展，不仅对人才数量的需求急剧增长，而且对人才质量也提出更高的要求。对化学、化工人才的开发来说，理工科高等学校教育工作的成效无疑是有重要影响的。以往我国各类高等学校教育工作的通病之一是偏重前人知识的传授，而忽视了对学生获取知识和运用知识的能力的培养，尤其缺乏对创造能力的培养。我们认为，知识和能力既有联系又有区别，大学生要有优化的知识结构，以便形成最佳的能力；在大学教学过程中尤应注重对学生能力的培养，在传授知识的过程中，正确处理知识与能力的辩证关系，注重把知识转化为能力。当今中外教育界都正在探讨学生智能的开发，这一问题的妥善解决将成为教育改革的一个突破点。

传授知识和培养能力的辩证关系

中外学术界对能力、智力和智能等概念往往有不同的理解，至今仍存在着争议。我们的理解是，知识是人们对客观事物的认识，包括直接知识和间接知识；能力则包括一般能力（即智力）和特殊能力（如兴趣、情绪、意志、性格等非智力要素）；一般能力包括注意力、观察力、记忆力、思考力和想象力等五个要素；一般能力与特殊能力诸要素的有机结合，又称智能，我们把它们都统称能力，它表现为人们对客观事物的认识和理解能力，以及运用知识创造性地完成实际任务的能力，如自学能力和创造能力等。那么，知识与能力之间究竟有什么联系呢？我们可以用自然界的蚂蚁和大象作一通俗的比喻。

有人说蚂蚁虽小其负重能力却远远超过大象，这一比喻是富有哲理性的①。因为蚂蚁负重可达其体重的数倍，大象负重则不过是其体重的几分之一。如果把体重比喻为一个人的知识量，把负重能力比喻为这个人的能力，那么上述比喻似乎可以表明知识和能力之间的对立统一关系。蚂蚁能力虽大不能没有体重。大象体重虽大并非毫无能力；没有知识的能力是空洞的，没有能力的知识是僵死的。可见既没有离开知识的能力，也没有毫无能力的知识。但知识并不等于能力，动物的负重能力并不一定与其体重成正比；一个人的知识越多，其能力并不一定就越强。大象之所以比不上蚂蚁，盖因其负重能力与其体重的比值小于蚂蚁。判定一个人能力的大小，不能仅看它知识总量的多少，而要着重看他获取知识和运用知识的能力。从一定意义上说，一个人的能力随着知识量的增长而增长，这便是"知识就是力量"的一种含义。实际上，相当多的人其能力的增长并不如他们知识增长那么快。除了知识要有必要的储备这个原因之外，还因为能力并不是自发地随着知识量的增长而增长的。由于知识和能力的状况存在差异，可以有四种类型的人：(1)知识多而能力强；（2）知识少而能力强；(3)知识多而能力弱；(4)知识少而能力弱。如果把第二种称作"蚂蚁型"，第三种称作"大象型"，那么第一种则可称作

---

①蔺无康："论作为'知识活化率'的能力"，大连工学院《自然辩证法信息》，1982年第1期。

"骆驼型"，作为"沙漠之舟"可负重荷而远行。古今中外的杰出科学家，如阿基米德、牛顿、达尔文、门捷列夫、居里夫人、爱因斯坦、鲍林、祖冲之、李时珍等，无一不是知识渊博而能力超群的人，他们是第一种类型的人才。有的人知识看来暂时少些但能力很强，其知识也可较快地得到充实而成为杰出人才，这样的人看起来并非知识非常渊博，却有惊人的创造。例如，1953年，华特生和克里克根据X射线衍射数据，提出了脱氧核糖核酸（DNA）的双螺旋结构模型，被誉为二十世纪以来生物科学最伟大的发现。可是他们二个青年人原先都不是研究生物学的，由于他们具有非凡的创造力（以丰富的想象力为先导），仅仅合作研究了一年半，就提出了这一划时代的分子模型，这是第二种类型的人才。我们所要造就的化学化工人才应是第一种类型的，既要能够掌握和探索化学化工技术的新知识和新规律，也要善于运用现有知识为四化建设开创新局面，因此更应强调能力的培养。

应如何处理传授知识与培养能力的关系呢？在现代科学技术发展的新形势下，对我们高等学校教育培养新型的化学化工人才的知识结构和能力结构，都提出了新的更高要求。总结建国以来三十多年办学的实践经验，我们体会到，理工科大学化学化工系培养的本科生，应该具备以下六种能力：独立获取知识的自学能力，进行实际操作的技能，通过语言、文字、绘制图表和计算等借以表达学术思想的表达能力，分析综合、归纳演绎等思维能力，进行工作的组织管理能力，从事设计和科学研究的创造能力。这几种能力都有各自的内容，而且存在相互联系，其中以自学能力和创造能力最为重要。为此，制订化学化工人才的培养方案时，我们认为，其专业口径应宽一些，基础理论知识要厚实一些，课时应精简一些，外文水平要更提高一些，实际能力的培养应看重一些。总之，目的是使我们培养的学生具备可以发展成为高水平的专门人才的潜力；主要着眼点是为了增强能力的培养，以适应我国化学学科迅速发展的要求，适应我国化学工业迅速发展的需要。作为教育工作者，我们应当理解，这些能力并不会自发产生，必须在教学过程中不断地培养才能逐步形成，即在很大程度上取决于教学计划、内容的合理组织和采取启发式的教学方法。我们不仅要教给学生"这是什么"、"应当这么办"，而且应使他们知道"这是为什么"、"怎么办"；教给学生的不仅是公式、定理、定律等现成的结论，而应当再现公式、定理、定律等发现的过程和方法。

改革高等化学化工教育的设想

结合近年来在教学实践中的体会，我们提出以下几点设想。

(1)放宽专业口径，改善课程设置，加强基础教学。

当前世界新的技术革命正在兴起，在化学化工方面，涉及新能源、新材料、生物工程、环境保护等领域都有广阔发展的前景。这就要求在化学化工的教育改革方面放宽专业口径，改善课程设置，大力加强基础，着重培养能力。从现有实际情况出发，应首先做到放宽专业口径，改善课程设置。我们主张一方面应大幅度地放宽专业口径，如以化工类本科生而言，可以设置以下四类专业：应用化学专业、化学工程专业、化工机械专业和化工自动化专业。另一方面，还应设置某些新兴领域的跨学科专业，如新能源、新材料（包括精密陶瓷、复合材料等）、生物工程、环境工程等专业。可以先开展专题研

究，招收研究生，逐步办起专业，培养本科生。

在加强基础教学方面我们认为，应大力增加基础课的比重，如上述那些专业的课程设置中，基础课(包括基础理论和技术基础)学时可占总学时的90%左右。对于化学化工人才的培养要求来说，应该把数学、物理、无机化学、有机化学、物理化学、化工原理和外文等基础打好。到高年级时可以选修某些专门化课程，因选修课类型不同，学生可以有不同的学习方向，这主要是为了扩大知识面和训练能力，而不是确定终身专业。实际上很多专业知识是在实际工作中才能真正学到。当然，随着科学技术的不断发展，知识的陈旧周期缩短，我们还要考虑“职业教育”、“终身教育”或定期返回大学再学习的问题。

加强基础课，主要是指提高基础课的教学质量，并不是一定要增加基础课的授课时数。主要是精选教学内容、加强实践环节、改进教学方法、着重能力培养。因为现行教学计划的四年授课总学时数已超过2500，周学时达20以上。如不精简授课时数，学生自学时间就不能相应增加，经常处于被动应付状态，学习主动性受到很大限制，很难开展课外科技等活动以开阔视野和发展能力了。为使学生在校四年间能获得比较系统而坚实的基础知识和基本训练，当然应该改善大学本科的课程设置，大致要求具备数学、物理、无机化学、有机化学和物理化学等基础理论知识；掌握化工过程基本原理、单元操作和设计；懂得电子计算机的算法语言和计算方法，能进行程序设计；有必备的工程力学、机械制图和电工基础知识。在实验操作方面要求能有自己动手安装和操作各种化学仪器设备的能力；对实验的结果能进行数据处理与综合分析，通过生产实习、课程设计、毕业设计（或论文）具有分析典型生产过程的基本知识或专题研究的工作能力；完成能综合运用所学知识进行工程设计或科研工作的基本训练。此外，还要有检索资料和交流信息的能力。以上各项对化学化工不同专业的要求还可各有侧重。

（2）发挥教师主导作用，更新教学内容，改进教学方法。

在新的技术革命要求下，基础课程也要反映现代化学化工技术的新成就。如有机化学课程，现在教学内容中的理论、概念较之十几年前新增加了30%左右。如反应历程、立体构象、分子轨道等；相应的实验课也要不断增添新的设备手段，让学生能系统地掌握化学实验技术和方法。

为培养学生的自学能力，对教师提出了更高的要求。教师应该抓住课程中的一条主线，由浅入深地把最基本的东西教给学生，使学生能举一反三。讲课中有时要适可而止，留下问题，指定参考资料或布置思考题，引导学生多思。只要把学生的积极性调动起来，他们就会主动地去查参考书，增进知识，从而锻炼自己的思维能力①。

对于高年级学生，更要着重培养他们的独立工作能力，如通过毕业设计或毕业论文，可以做到：①结合查阅文献资料及使用工具书等，综合运用所学知识，进一步加强自学能力的培养；②通过完成某项课题的任务，培养工程设计或实验研究的能力；③通过数据处理、总结报告等要求，培养准确表达科学思想的能力②。

(3)在学习上给学生以自主权，实施竞争原则，奖励先进。

---

① 袁履冰：“研究教育规律，提高教学质量”，《辽宁高等教育研究》1982年第1期。

② 袁履冰：“指导毕业论文应着重培养学生的独立工作能力”，大连工学院《教学与研究》1983年第1期。

在切实加强“三基本”的前提下，应适当减少现行教学计划上授课总学时，增设选修课；允许一些自学能力较强的学生，通过自学考试取得免修某门课程的权利，可以多选修一些反映先进科学技术的选修课。对现行的考试制度和考试方法也要大力改革，使学生成为知识的主人而不是奴隶。

与此同时，应大力开辟“第二课堂”，增进智能培养。过去把课外活动仅仅看作是课堂教学的补充和延伸，甚至看成是多余的负担。为适应新的技术革命的要求，课外科技活动应当看作是不可缺少的“第二课堂”。这个课堂也应列入整个教育计划之内，但它不受传统的教学方式的约束。开辟第二课堂可以经常举办学术讲座和讨论会，鼓励学生参加学术活动，指导学生搞好学生科技协会，鼓励学生提出不同的见解和观点，启迪智慧的火花，活跃学术的气氛。创造尊师爱生，师生在学术问题上平等的良好学风，打破目前有些理工科高等院校学术空气沉闷的不正常局面。

(4)改善学生的知识结构，使之具有发展本门科学技术的战略眼光。

在现代科学技术的发展中，知识的深度和广度的矛盾更加突出。目前，化学化工专业的大学生知识面过窄是比较普遍存在的缺陷。有些大学生或研究生，由于不了解本专业以外的某些知识，往往思路不广，学习呆板，缺乏创新能力，直接影响到他们对某些理论问题的理解和研究工作的开展。在当前，开展科技史和自然辩证法方面的教学，是调整知识结构的一项有效措施。有些科学家曾提出，马克思主义哲学是指导一切的，搞自然科学和工程技术的应该学好自然辩证法。研究生不仅要学会写专业学术论文，而且还要善于对本门专业的发展史进行唯物辩证地分析①。为此，也可以在化学化工课程中结合本门学科的发展史来进行辩证唯物主义的教育②。我们要培养学生经常自觉地关心当前国内外化学化工学科及有关学科的新进展，以防止随着知识的老化而造成思想的僵化，以延长和保持创造性思维能力的青春。

袁履冰　林永康

2.建立合理的化工教育结构

所谓化工教育的结构，是指构成化工教育的各个组成部分和要素按照一定的规则相结合的方式。化工教育体系的结构决定着化工教育的特性和功能。化工教育的改革，就是以建立合理的结构为目标，排除不合理的因素，改变其不合理的结构，以适应化工教育不断发展的要求。因此，研究化工教育的结构和改革问题，就是用辩证唯物主义的观点，从我国化工教育的实际出发，吸收国际上有益的经验，把化工教育作为一个整体，分析研究影响化工教育结构的各种因素，确立各个组成部分和要素之间的联系，把握其规律性，按照一定的规则和比例关系建立起具有合理层次结构的化工教育体系，从而达到最优化发展化工教育的目的。

不论从全国看，还是从一所化工院校看，化工教育体系包括着许多大大小小的子系统，有各种各样纵横交错的网状立体结构。如总体结构，人事结构，知识结构，管理结

① 《中国自然辩证法研究会通信》，1982年第19期。

② 袁履冰：“讲授有机化学时结合化学史内容的体会”，大连工学院《教学与研究》1982年第8期。

构，条件结构等。在人事结构中，包括着干部结构，教师结构，学生结构等；在知识结构中，包括着课程结构，基础知识结构，专业知识结构等；在条件结构中，有图书资料结构，教室结构，实验室结构等；在管理结构中，有人事管理结构，教学管理结构，科研管理结构，生产管理结构，服务管理结构等。

化工院校正像所有高等院校一样，是具有封闭和开放双重性的教育系统。这个系统的本质属性，从封闭性看，决定于院校内部上述各组成部分和要素的结构；从开放性看，既决定于社会系统的各种结构（如人口结构，经济结构，政治结构等），又决定于自然系统的结构（如生产力要素及其结构，化工科学技术结构，自然科学理论体系结构等）。

研究化工教育的结构问题，有利于拟订出最理想的化工教育改革方案，对化工教育作出具有远见卓识而富有成效的改革。

现代化工科学技术的发展向化工教育提出的要求

高等教育的结构要与科学技术的发展和社会结构的状况相适应，这是高等教育发展的一条基本客观规律。化工教育也不例外。化工教育是随着化学工业的出现而产生的，是随着化学工业和化工科学技术的发展而发展的。至今，化工教育已形成了一个重要的教育分支。所以，为了研究化工教育问题，首先研究化工科学技术的发展及其对化工教育的影响是完全必要的。

目前，化学工业的发展在全世界受到普遍重视，象美、苏、法和联邦德国这样一些工业比较发达的国家，其化学工业的产值，仅次于产值最高的机械工业，名列第二。从发展速度看，普遍高于整个工业发展的平均速度，并且各国对化学工业的投资占有极重要的地位，有日趋提高之势。近些年来，第三世界国家也加速了化学工业的发展，化工生产上升较大。

我国的化工生产，虽然早在古代就以化学工艺的形式开始了，但是，当十九世纪西方化学工业开始向现代化学工业过渡时，我国却由于反动腐朽的封建统治，严重地阻碍了化学工业的发展。直到清朝封建统治被推翻之后，现代化学工业在我国才开始起步（1919年，由美国人设计，在天津创办了我国第一个碱厂——永利久大塘沽碱厂），而且发展极为缓慢，到了1936年底，才由我国自行设计，又在南京建成了永利硫酸铵厂。可以说，解放前，我国化学工业寥寥无几。新中国诞生后，经过三十多年的大发展，化学工业总产值已占全国工业总产值的百分之十左右，平均每年递增率为19%。如今化学方法和化工产品已渗透到我国国民经济的各个部门，科学技术的各个领域和社会生活的各个方面。我国是个人口众多的国家，对化工产品的需要量，是任何一个国家都难以比拟的。而且我国的现代化学工业史比较短，经济技术指标也比较落后，正需要大力发展。这就对大力发展化工教育产生了客观需要，为培养更多的化工专门人才提供了客观根据。

对化学工程技术人才的要求，不单是个数量问题，而且对质量也提出了高的要求。这一点，从下面将要讨论的化学工业和化工科学技术的发展趋势和特点，以及对化工教育的影响中，可以清楚地看出来。

(1)发展速度快。化学工业采用的科学技术成果日益增多，产品种类千变万化；同时

科技队伍不断壮大，科研效率迅速提高，导致信息量剧增。

据统计，科学技术文献的年增率为5—7％，每隔15年至20年增加一倍。美国《化学文摘》在1907年刚刚创刊时，每年摘录2千多篇，1972年达到34万篇，进入八十年代以来，每年摘录1万4千多种杂志，已达40多万篇。

随着科学技术知识的增长，科学技术知识的新旧代谢周期也在缩短。到七十年代，有的代谢周期已经缩短到15年左右。这种情况，在化学科学技术方面表现得特别明显。

化学工业和化工技术发展之快，不仅突出地表现在产品的更新换代方面，而且象三酸二碱已有百多年历史的老产品也仍在不断发展。

这就清楚说明，化学工程技术人才，都要坚持不懈地进行知识代谢更新。

（2）化学工业具有生产技术多样性和复杂性的特点，加速化工科学技术向生产力的转化，是这种工业发展的重要途径。

化学工业和化工科学技术，不仅更新换代快，而且产品型号繁多。目前化工产品已达到几万种，同时每年都有几百种新产品在诞生。这反映了化学工业生产技术的复杂性，它具体体现在：①化工产品多种多样，既有粗产品，又有精产品；既有正产品，又有副产品；既有最终产品，又有中间产品。②同一种原料，可生产多种不同的产品，如石油裂解，废物综合利用，煤的综合利用等。③获取同一产品可采用不同的原料，如合成氨，既可用煤作原料，又可用石油作原料，还可用天然气作原料。④制造同一种产品可采用不同的工艺流程，如生产乙二醇就有四种流程，生产碱有三种流程。⑤对同一种产品的同一种流程需要多种技术方法，如核燃料的生产或再生，可同时采用萃取法、离子交换法和沉淀等方法分离和纯化。

由此可见，为了提高化工生产的经济效益，使化工产品长期处于领先地位，具有强大的竞争能力，就要做好化工科学技术的开发工作，加速化工科学技术向生产力的转化，充分发挥科学对生产的作用，选取最优化流程，适应更新换代快的要求。

化工生产技术的这一特点，要求高等化工院校培养的化学工程技术人才，具有较宽的知识面和迅速获取科技情报的能力，同时重视化工科学技术与生产的联系，学会做转化工作。

（3）化学工程技术诸要素的辩证发展和结合，促进了化学科学向生产力的转化。

从工程技术的共性看，材料、能源、工艺和控制，不仅是一般工程技术的要素，而且也是化学工程技术的诸要素。不过联系到化学工程技术的特点，工艺的作用更为突出。在化学工程技术中，工艺的含义，除指生产工具的制造工艺外，还指用化学方法生产各种产品的工艺，而且后一含义是主要的。

在化工生产中，生产的产品一般与使用的设备、机器是两回事，有时只能生产制造设备、机器的原材料，而不是设备、机器本身。如果把化工材料加工成设备、机器，还必须辅以机械加工方法。这时得到的产品，既是化学变化的产物，又是机械作用的产物。

材料是一切工业的基础，而生产材料又是化学工业的主要目的和任务。所以，化学工业不仅是其它工业的基础，而且也为自身的发展奠定了基础。

化学工业与能源工业也有密切关系。它既需要能源，又能开发能源，提供能源。

自动控制和化学工艺是相互促进的，工艺过程连续化是实现自动化的基础，而自动化控制又使工艺过程的连续化和效能得到充分发挥。

从化学工程技术发展的历史看，各个要素在不同的历史条件下，其地位和作用是不同的，并依据一定条件相互转化，从而使化学工程技术的发展，出现了一次又一次的突破。如在古代，工艺起着决定作用；在近代，先是能源起着决定作用，进而材料又起着决定作用；在现代，由控制起着决定作用，进而发展到四种要素辩证综合起着决定作用。尤其自本世纪以来，化学工程技术经历了由化学工艺，经过单元操作，一直到综合性的发展过程，使四要素相互制约、相互促进的关系更为密切，由单因素起作用发展到四要素综合起作用。现代化工科学技术的发展，还促进了化学科学以及其它科学向化学工程技术的转化，使化工科学技术建立在坚实的科学基础上，实现了化工生产科学化。如化学热力学和化学动力学，在十九世纪是形成时期，进入二十世纪以来，在自身的理论体系加速发展的同时，也加速了向化工技术的转化。

材料、能源、工艺和控制四要素，有联系科学和生产的作用。当它们物化成生产力时，都体现在生产工具上；当把它们上升成科学理论时，就成为工程技术科学的基本组成部分。所以，要充分发挥材料、能源、工艺和控制四要素的作用，不是个单纯技术问题，而且有科学理论问题。只有以坚实的科学知识为后盾，四要素才有综合发挥作用的可能。

由此可见，在高等化工教育中，加强基础理论知识和专业理论知识的教育是十分必要的。

（4）综合化发展趋势。化学工业的结构，在现代化学科学技术发展的条件下，已趋向于形成“科学——技术——生产”综合化的体系。

化学科学要转化成生产力，必须通过化工技术这个中介才能实现，大力发展化工技术会加速化学科学向生产过程的转化。同时，化工技术的发展，又依赖于化学科学和化工生产的发展。所以，随着现代科学技术的发展，化学科学、化工技术和化工生产之间的关系越来越密切。化学企业形成“科学——技术——生产”综合化体系已是必然趋势。

化学工业的发展，有两种同时并存的趋势：一是小品种的发展，种类繁多，更新换代快，生产工艺过程变动频繁；二是大品种的发展。

化学工业属于知识密集型的工业，一般说，规模增大（当然不是越大越好，任何事物都有质量和数量辩证统一的合理界限），成本降低。所以，不论从提高经济效益，还是从保护环境看，都必然导致现代化学工业的发展趋向于大型化和综合化。如30万吨大型化肥厂和乙烯生产厂的设计和建立，就是一类综合性的工程；石油和煤的综合利用，也是综合性很强的大型化学工程，等等。

随着化工科学技术的发展，我国各化学工业部门必然要反映和适应这一发展趋势，兰州化学工业公司、吉林化学工业公司等就属于综合性的大型联合化工企业。在这种企业中，从工程技术人员的知识结构看，是多方面的，即具有“一专多能”的知识结构。这种知识结构要求既要有技术知识，又要有科学理论知识；既要有实践经验，又要有理论知识；既要有专业知识，又要有管理科学知识。只有专业知识面很窄的工程技术人才（尤其是高级工程技术人员），难于发挥太大的作用。从企业整体看，工程技术人员的

知识结构是多层次的，是由高级工程师、工程师、助理工程师和技术员构成的。而且各个层次中，不仅要求科研人员、设计人员和生产人员相互配合，还要求工艺、设备和自动化控制等方面的工程技术人员相互配合。

现代化工教育的知识结构

为了培养符合"一专多能"知识结构的化学工程技术人才，根据化工教育要与化工科学技术相适应的关系，从上述化工科学技术发展的特点和趋势出发，必须把高等化工教育建成合理的知识结构，高等化工院校应建成完善的"教学——科研——生产"三结合的综合教育体系。

化工教育的内容基本上属于化学科学技术的范畴，但机械工程与化学工程的关系十分密切。培养的化学工程师，应具有化学科学家和机械工程师两者结合的特点，现代化工科学技术，又具有理论性、技术性和实践性较强的特点，所以，在现代化工院校中，应通过建成"教学——科研——生产"三结合的综合教育体系，使学生同时受到以下几方面的教育：

（1）重视科学方法论和化工发展史的教育。

科学方法在学生的知识结构中占有很重要的地位。它既是知识结构的一个组成部分，又是从实践知识向理论知识，或从知识向能力转化时不可缺少的手段。如果一个学生只学知识不学科学方法，那么他不仅掌握知识速度缓慢，而且已掌握的知识也难于发挥作用。所以，科学方法论的教育应贯穿于一切教学活动之中。只有这种教育搞好了，才能自觉地学会用马列主义的理论指导自己的思想、学习和工作，有助于指导科研、设计和独立地分析解决问题的能力。

高等化工院校现在用的教材有一百多种，可是在绪论或有关章节中讲一点化工发展史的却不多，不论从扩大学生知识面，还是从提高思维能力来看，适当讲一点简史是必要的。各个学科的叙述方法和研究方法虽有联系，但也往往有所不同。只有系统的理论教学，还不能使学生完全了解探索科学规律的途径。如果在各种教学中，都能运用逻辑过程和历史过程统一的方法，讲一点化工发展史，那么对缩短学生的认识过程，提高学生的思维能力是有利的。同时，结合化工课程教学讲一点我国化工技术的发展史，对学生进行爱国主义教育和提高学习自觉性也是有益的。

（2）加强基础、扩大知识面。

在化工教育中，所谓加强基础教育，就是指加强基本知识、基本理论和基本技能的教育。这是化工科学技术的发展对化工教育提出要求的又一个重要方面。这一要求不仅适用于从事科研和教学的人才，也适用于化工厂的工程技术人才。当我们把化工厂看作一个知识结构系统时，会看到许多纵横交错的过程具有共同的科学知识基础。尽管一个化工厂既有工艺，又有机械设备；既有物理过程，又有化学反应过程，但许多化工厂的生产过程，往往是工艺与机械，物理过程与化学反应过程交织在一起，有着共同的单元操作。而且每个单元操作中又有着共同的物理和化学原理。所以，加强传递工程和化学反应工程及其基础理论的研究和学习，对提高化工院校毕业生的适应性是有利的

尽管化工单元操作有一定的独立性，但由于化工厂的结构系统是个严密的有机结构整体，各个单元操作按一定的规则联结在一起，所以，还要使学生掌握系统工程的知

识。

为了扩大知识面，仅靠加强学习化学工程技术共同的基础理论知识是不够的，还要注意解决专业范围偏窄的问题。设专业应以学科为基础，同时根据实际需要进行全面规划，合理布局和配套。从现代化工教育的知识结构看，一般主张按工程、工艺、机械、自动化、管理和应用理科六个方面设置专业比较好。

高等化工学校的学生通过加强基础和扩大知识面，有利于掌握住化工生产和化工科学技术发展的基本规律和系统的理论知识，培养综合考察化工生产过程的能力。

（3）贯彻理论联系实际的教学原则，使学生在理论和实践两个方面都获得必备的知识。

理论联系实际是个普遍的教学原则。在一定条件下，强调加强基础理论学习是对的。从化工科学技术发展的现状和趋势看，也应该强调基础理论的学习。但是，与此同时，还要重视实践知识的学习，才有利于理论联系实际。

理论联系实际的教学，使学生不只学到动手能力，还可扩大知识面，学到许多宝贵的实践经验知识，培养学生独立发现问题和解决问题的能力。

实际问题丰富多彩，涉及到的学科知识面比较广。如果学生的知识面太窄，就不利于联系实际解决问题。一位只懂理论而缺乏经验知识的工程师，不可能设计出合理的化工生产流程。高等化工院校在整个教学过程中，必须使学生既与抽象的概念，又与生动的实践相联系。只有培养出既动脑又动手的毕业生，才有可能符合未来化学工程师的要求。

（4）重视智能教育，提高毕业生的独立工作能力。

在化学工程技术人才的知识结构中，知识和能力有相互依存和相互促进的关系。智能是知识和能力的综合体现。掌握知识是培养能力的基础，要想培养出各种能力，必须要有宽厚的知识。反者也然，如果缺少必备的能力，不但不能掌握好知识，而且已掌握的知识也难于发挥作用。所以，知识和能力是在相互促进中发展，在辩证结合中生辉。

从目前高等化工教育看，应注意培养学生有下列各种主要能力：独立获取知识的能力，思维能力，运算能力，实验能力，创造能力，写作能力，表达能力，组织管理能力等等。而要真正使学生具备这些能力，必须贯彻到各门课程的教学和各种教学活动中去。不仅在课堂教学中，而且在现代化的实验教学中，通过模拟实验和理想实验，也可培养学生的想象力、创造力和科学思维的能力。利用现代化的教学手段，还能培养学生形象思维的能力。

化工教育体系应具有多层次的结构

任何一个化工企业，从知识结构看具有多层次性，因此需要的科技人才其水平高低也不应该一样，也具有多层次性。一般说来，至少有三类人员：一是能进行创造性研究和总体规划的高级工程技术人员；二是能管理和开发生产的工程技术人员；三是能维护正常生产的专门技术人员。这三类人员保持宝塔形的比例关系和结构，是比较合理的。但是，我国的现状是个两头小中间大的囊核形（高级工程师：工程师：技术员＝1：37：8），其结果是该由技术员办的事，却由工程师代办，造成人才使用不合理和严重浪费。为了适应化工科技人员宝塔形结构的要求，化工教育体系必须包括比例合理的各类

学校；培养的人才，从研究生、本科生、专科生到中专生，层层都有。当然，在现代化工企业中，对工人也要普遍地进行一定的技术教育。从目前化工教育的现状看，问题最大的是中专教育，必须大力发展才能满足现代化学工业发展的要求。在一些现代化水平高的化工企业中，几乎每一个工人都要起码达到中专的水平才能胜任工作。

化工科学技术知识的代谢，除了要求各类工程技术人员，随着化学工业和化工技术的发展不断接受再教育外，领导干部和管理人员也要进行相应的再学习。为此，就要办好各种类型的培训班，从而完成再教育的任务。

化工科学技术人员的再教育，不能只进行一二次，而是个长期任务，要不断地反复地进行，达到终身教育的目的。

化工教育是个相当复杂而艰巨的任务，各类学校要办，各类企业和工厂也要办，才能使各类化工人才的比例和知识结构逐渐趋向于合理化。

高等化工院校中教师队伍的结构

高等化工院校能否按照合理的知识结构教育学生，关键在于教师队伍结构的合理性。

什么是教师队伍的合理结构呢？怎样才能实现教师队伍的合理结构呢？

教师队伍的整体结构是比较复杂的，从不同的角度出发，可分成许多不同的层次。如按组织形式，可分成院（校）、系、室、教师个人四个层次；按年龄可分成老年、中年、青年三个层次；按职称，可分成教授、副教授、讲师、助教四个层次；按工作性质，可分成授课教师、实验教师、科研教师三个层次；按授课类型，可分成公共基础课教师、专业基础课教师、专业课教师三个层次；按起作用的大小，可分成学科带头人、骨干、一般和教学辅助人员四个层次，或分成主讲教师、辅导教师等等。

尽管教师队伍的结构纵横交错，层次复杂，但归结起来不外乎有两种类型：一是人员结构，二是知识结构。在一般情况下，这两种结构相互制约相互促进。而且在一定的条件下，人员结构决定于知识结构。在教师队伍建设中，应按照合理的知识结构去配备教师和培养教师。

就教师队伍的知识结构看，包括着教师个人的知识结构和队伍整体的知识结构两个方面。教师个人的知识结构既是整体结构的基础，又受整体知识结构体系的制约，不能脱离整体结构的要求和发展趋势。

为了适应高等化工教育的要求，教师个人应具备什么样的知识结构呢？当然，对不同职称的教师，其要求是不一样的。现仅从教师知识结构的共性出发，归纳成几个方面：

（1）具有马克思主义的世界观和科学方法论的知识。任何一位教师的知识结构中，如果缺少马克思主义的世界观和方法论作指导，那么他所掌握的知识和具备的能力，就不可能发挥最有效的作用。现代科学技术发展的趋势是综合性强，没有唯物主义世界观和辩证的方法论作指导是难以驾驭的。

（2）具有渊博的知识和系统的知识体系。教师是教学生的，仅有教科书那点知识是不够的。一位有才华的教师，他所具备的知识，不论从深度还是从广度衡量，要比教给学生的知识高出十倍甚至几十倍才行。教师的知识应包括理论和实践两大范围，即便

是教基础理论课的教师，也要有丰富的实践知识，尤其是科研实践。如果教师的知识面太窄，就不可能培养出知识面较宽的学生。教师的知识面绝对不是在做学生时期就能完全具备的。大学生的教育只能为工作以后的发展打下基础，要扩大知识面，还需在工作中结合需要而逐渐展开。目前化工院校的教师学点心理学、高等教育学、管理学等知识，看来是有益的。

（3）具有多面化的职能。在综合化的教育体制中，教师必须要有教学和科研两套本领，不只能脱产搞科研，还能边教学边科研；既掌握设计程序，也懂科研程序，把设计和科研密切结合起来。

教师必须熟练地掌握外语工具，并具有较高的实验技能和运算能力，这对向学生传授先进的科技知识都是必备的职能。

（4）应有明确的科研方向和丰富的资料积累。

只有这样的教师学术思想才活跃，才能经常把新的知识纳人教材，不断向学生教授新学问，唤起学生热爱自己专业的兴趣。同时，他还有随时抓准科研方向的能力，有利于快出成果。

教师的知识结构并不是一成不变的，这种结构会随着化工科学技术和化工教育的发展而发展。同时教师随着年龄的增长和主观能动性发挥的作用不同，其知识结构也在变化。教师个人知识结构的变化，必然导致整个教师队伍的知识结构也在变化。不仅老、中、青的比例在变化，而且水平高低的比例也在变化。这些都是保持教师队伍知识结构的合理性必须要注意解决的问题。

至于教师队伍的人员结构，在明确了知识结构之后就好办了。

人员结构主要有两个衡量指标：一是教师与学生的比例关系，二是教师队伍自身中，各种不同职称教师的比例关系。这两种比值的确立，都是以教师个人的知识结构已达到合理为前提的。目前，在教师个人的知识结构还有不合理因素存在的情况下，要立即解决教师队伍整体结构的合理性问题是不现实的。对教授、副教授、讲师、助教之间的比例关系，有人主张是个“正三角形”（或者“宝塔形”），有人主张是个“鼓形”，还有人主张是个“倒三角形”。总之，关于这个问题，意见纷纭。笔者认为，这方面的观点先不必强求统一。教师队伍整体的知识结构是否合理，关键不在于形式。只要每位教师个人的知识结构合理了，就有了使整个结构合理的可能。然后再根据每所院校专业设置的具体情况，和对现代化工教育的知识结构要求配备教师，就能建立起比较合理的整体结构。

要使教师队伍的结构在今后五至十年内达到完全合理的状态，应把工作重点，一是放在中年教师的培养和挖潜上，二是放在青年教师的培养上。尤其是对青年教师的培养，一定要有远见和决心，千万不能放任自流。

张道民

（四）开发智力，迎接新的技术革命

在当前新技术革命中，以下三个问题是值得注意的：第一，技术革命是智力发展的产物；第二，新的技术革命对教育提出的挑战；第三，教育必须面向未来。

技术革命是智力发展的产物

近来，国内的学术界、科学技术界都在纷纷讨论所谓的技术革命。1984年10月，国务院召开过一个座谈会，专题讨论新的技术革命和对策。中央领导同志号召我们要认真地研究世界范围内新的技术革命的动向，充分地利用新的技术革命的机会，研究新的技术革命的挑战。在这以后，北京、上海以及其它许多城市，还有大专院校、科学界，都围绕着新的技术革命进行了研究、讨论。如果把新的技术革命比拟为一次浪潮的话，我们似乎已经感觉到新的技术革命的浪潮对我们的冲击。我们国内讨论新的技术革命，大约也就只有半年多的时间。在学者们中间也许早一些，但也不过是一两年的时间。可是在国外新的技术革命已经广为宣传了，新的技术已成了激烈竞争的对象。因此，现在不是有无新的技术革命之争的问题了，而是如何认真研究，提出对策的问题了。那么，新的技术革命的存在，是以什么为标志呢？笔者认为大概有四个标志。

（1）当代科学技术的重大突破。第二次世界大战结束后，在世界范围内获得了许许多多的重大科学技术突破。比如说，原子弹、氢弹的爆炸，从原子弹的试制成功到原子能的和平利用，从第一台电子计算机的试制成功到微型电脑的社会化；从电缆通讯发展到光导通讯、卫星通讯；以1953年发现基因的双螺旋结构到目前基因公司的大量建立和基因的商品化；从传统的非再生能源到现在再生新能源的问世；从传统的天然材料到现在的复合材料；从基本粒子的新发现到人们征服宇宙空间、登月，而且在太空行走，等等。这一系列重大的科学突破，都是划时代的。可以说，是一次新的科学革命、新的技术革命的象征。

（2）知识急剧地增长和急剧地更新。最近二十年来，由于科学技术的进步，知识大量地增加。人们称现在是所谓“知识爆炸”的时代，或叫作“知识革命”的时代。“知识革命”也就是技术革命。这也是新技术革命的表现之一。

（8）知识或者说信息，已经成为资本，并且是决定性的资本。这个思想已经成为普遍接受的观点了。知识已经不是作为一种知识形态而存在了，它已作为一种资本而存在了。在本世纪初，智力对生产力提高所起的作用大约只占5％，而到目前为止，智力对劳动生产率的提高所起的作用已超过50％。这也就是说，智力可以转化为生产力。

（4）智力劳动者急剧地增加。从事脑力劳动的人数在一些科学技术发达的国家已经超过了劳动力总人数的50％，如在美国、日本、联邦德国这些国家。这是新的技术革命的又一个特征，并且是由工业社会向“信息时代”、向知识高度密集的社会过渡的一个必要条件。

总之，从以上四个方面我们可以看出，当前确实存在一次新的技术革命，这已经是毫无疑义的事实。

那么，什么叫做技术革命？技术革命和科学革命又有什么关系？

应当指出：科学与技术不是一个概念。科学与技术这两者是密切相联系的，但又具有各自的科学内容。一般来讲，科学是以研究和认识客观事物的基本规律为对象。它是发现和认识新事物，解释新的自然现象，创立科学规律的。技术科学是研究工业生产技术的科学。它是指导生产，提高产品质量和生产效率不可缺少的一门科学。技术是科学到生产之间的桥梁。在人类的历史上，曾经发生过多次科学革命，也发生过多次技术革

命。

到目前为止，有过三次科学革命。第一次科学革命发生在1687年，它的标志是牛顿发现万有引力，包括在此之前的哥白尼和伽利略所创立的学说。这些重大科学发现，就构成了第一次的科学革命。这次科学发现为什么能称之为一场科学革命呢？因为这些科学理论的建立，解决了人们认识事物的一个最基本的客观规律，即从宏观上认识物质运动的最普遍的规律。这个规律的发现，不仅影响到物理学的发展，而且影响着其它的自然科学和技术科学，所以它是一场科学领域的革命。第二次科学革命发生在二十世纪初，它是以1900年普朗克创立的量子力学和1905年由爱因斯坦创立的相对论为标志的。为什么这两个学说的建立又构成了科学的革命呢？因为这两个学说的建立又解决了人们从微观世界认识物质运动最普遍的规律。我们知道，在量子力学和相对论发现之后，相继创立了量子化学、量子生物学，使得人们对客观世界的认识从宏观向微观世界的更深层前进了。我们目前正处在第三次科学革命之中。第三次科学革命就是生命科学的革命。这次革命要比前两次革命更为深刻，它不仅指导人们认识客观世界的物质运动规律，而且人类将要开创自己认识自己的时代。生命科学将使人们自己认识自己，要解决生命领域中的许多问题，所以它比前两次革命就更为深刻。这次革命就是从1952年英国学者沃森所发明的基因结构开始的。当初，这还作为一个玄妙的问题被人们所研究，而今天，在世界一些技术发达的国家，已经建立了许许多多基因公司。基因已经作为一种商品在出售了，基因可以重组，培植新的品种。

科学革命一般来说是技术革命的先导。科学革命为技术革命奠定理论基础。人类历史上曾经有过多次的技术革命（或称工业革命）。当然，严格说来，工业革命与技术革命在涵义上还是有所区别的，但在这儿是把它们同等看待的。粗略来讲，可以把技术革命看作工业革命，因为技术革命与工业革命关系很密切。对于这个问题，学者们的看法并不完全一致。有的认为有三次，有的认为有四次，不过多数的学者倾向于四次论。第一次工业革命发生在十八世纪六十年代，主要在英国、美国，后来影响及于整个欧洲。这次革命主要是以纺织机械的应用以及用煤来冶炼铁矿石为标志的一次革命。这就是历史上比较著名的产业革命。第二次工业革命发生在十九世纪四十年代，也是在以英国为中心的欧洲出现的。这次革命是以蒸汽机的发明，以铁路和转炉炼钢为标志的。第三次工业革命于二十世纪初发生在美国。这个时候技术革命的中心已经由欧洲转到了美洲。这次革命是以汽车制造、电力的广泛使用和化学制品的大量生产为标志的。

为什么会出现工业革命的转移呢？这就可以从智力开发，从兴办教育找到答案。近代的高等教育主要发源于欧洲，起源于十二、十三世纪。从欧洲的学院算起，有近八百年的历史。由于欧洲的高等教育比较发达，这样就储备了人材，为欧洲科学技术的进步打下了基础，所以前两次工业革命就发生在欧洲。到了十九世纪末期，1861年到1865年，美国发生了南北战争，这次战争以林肯领导的北方新兴的资产者战胜南方的奴隶主而告终。这次战争解放了农奴，解放了生产力。这时的美国要求大量发展教育事业以适应新兴的资本主义的需要，于是建立了许多的大学，著名的麻省理工学院就是1861年建立的。所以，工业革命中心的转移，完全说明了教育中心的转移。

那么，科学革命与技术革命两者有什么区别呢？一般来说，科学革命的直接后果是导致人们思想方法上的改变。而技术革命除了导致人们思想方法上的变革以外，还将导

致人们生活方式、社会生产方式的变革。这就是技术革命与科学革命区别之所在。所谓技术革命，顾名思义，是指在技术领域中发生的急剧的、带有根本性的变革。大量事实证明，新的技术革命已经出现，而且正在加剧进行。

技术革命与教育到底有什么关系？科学技术与教育有着密切的联系。教育是培养人材的，它直接为技术革命、为技术的发展输送人材，而技术的进步和技术革命的结果又丰富了教育内容，促进了教育的发展。所以，科学技术与教育是互为条件、互相促进的。那么到底谁决定谁呢？谁在先谁在后呢？我们知道，科学和教育都是属于上层建筑，教育渊源于人类的劳动实践，科学也是渊源于人类的劳动实践，所以两者都是由生产实践所决定的。如果我们硬要排一个顺序的话，也许是人类的生产劳动实践导致知识的积累，然后由于传播知识的需要而出现教育。从这种意义上讲，可能是科学研究要先于教育。

为了要说明科学技术同教育的关系，下面列举一下近代高等教育发展史上的四件大事。

（1）文艺复兴和第一工业革命。我们知道，十四世纪至十六世纪，欧洲发生了文艺复兴运动，这是一次资产阶级革命的运动。这个运动的宗旨主要是冲破中世纪欧洲的黑暗封建统治。有许多著名的思想家、文学家、科学家都积极地参加了文艺复兴运动。而文艺复兴运动的直接后果，就是使教育与宗教分离，使科学与宗教分离，大力地提倡科学。所以在文艺复兴以后，欧洲的教育有了很大的发展。首先在法国，拿破仑时代创立了许多工业专科学校，如著名的法国高等理工学校等。当时为了适应资本主义发展的需要，在出现这些新兴的学校的同时，欧洲中世纪形成的古老学校，如法国的巴黎大学，英国的剑桥、牛津大学等等，也在教学内容上进行了某些改革，力图摆脱宗教的束缚，增加了自然科学的知识。文艺复兴运动以后，欧洲的高等教育已经出现了一些新的特点。概括起来有三点：第一，从重视文科发展到兼顾、重视自然科学，特别是重视实验科学。在文艺复兴运动以前，基本上没有独立的实验科学，而文艺复兴运动以后，各门实验科学纷纷脱颖而出，如物理、化学、天文学、生物学都相继成为独立的科学。第二，从专门为统治阶级培养人才而发展到为实业而培养技术人才。中世纪的大学都是培养贵族的，都是培养统治阶级的人才，只学宗教、神学、伦理学。自然科学在大学是没有地位的，而且信奉自然科学要遭到教会的迫害。文艺复兴运动以后，自然科学在大学已占有了重要的地位，学校开始为实业界培养技术人才。第三，从单一的学科发展到多学科。十四世纪以前的大学，基本是学神学。大学都被教会统治、把持，学科非常单一。比如在社会科学方面，最早就只有神学，后来才由神学发展到哲学，哲学是由神学发展而来的。所以有人说不懂神学就不懂哲学。至少对于研究哲学史来说，这话可能有一点道理。后来又由哲学发展出社会科学的许多学科。自然科学最早在大学里只有一个自然系，后来又发展出了天文学，从天文学分出了数学，从数学分出了物理学、化学，以后越分越细。总之，文艺复兴运动的直接结果是促进了高等教育的发展，为第一次工业革命的兴起培养了人才。

（2）英国的新大学运动与第二次工业革命。1826年，在英国出现了规模较大的所谓“新大学运动”的事件。这个运动的矛头也是指向中世纪传统的古老大学。新大学运动的宗旨是倡导发扬民主、破除迷信、提倡自然科学。这次新大学运动可以说是第二次

工业革命的先声。它为工业革命积蓄了人才，作好了准备。为什么在1826年前后在英国会发生这次新大学运动呢？这首先要从蒸汽机的发明说起。蒸汽机的发明极大地震动了科学界和实业界，大家都感到技术的重要。传统的古老大学已经不能适应当时资本主义发展的需要了。恩格斯在《自然辩证法》中曾经称蒸汽机是“第一个真正的国际发明”。这有两层意思：第一，蒸汽机的发明冲破了国界，它不是由一国的科学家，而是由当时欧洲数国的科学家，先后经过多次的改进而共同合作发明的。第二层意思，蒸汽机的发明不只是影响到一个国家的生产发展，而是影响到世界生产的发展。在十九世纪中期，还出现过三大发现，这都是我们所熟知的。恩格斯也称三大发现为人类历史上发明的高峰。在前后大约三十多年的时间，出现了三大发现。这就是1825年的细胞发现，1836年的能量转化定律的发现，1859年达尔文进化论的创立。这三大发现也出现在欧洲。这些重大的发现，可以说就是导致新的大学运动的直接因素，也促使了第二次工业革命的形成。新大学运动以后，英国以及欧洲其他各国的高等教育获得了蓬勃的发展。作为新大学运动的先声，是1826年成立的英国伦敦学院（它是现在伦敦大学的前身）。在新大学运动以后，欧洲的大学又形成了新的特点。归纳起来也有三点：第一，大学开始建立在工业城市和工业区，这就出现了教育与生产结合的最早形式，也是在人类历史上把教育与技术革命直接联系起来的最初尝试。第二，资本家兴办教育，私立大学相继出现，智力开始成为资本。在此之前，大学都是教会大学，也就是教会办教育。新大学运运以后，资本家开始把办教育看作一种投资。私立大学至今仍是资本主义各国高等教育的一个重要组成部分。资本家为什么舍得花钱办大学呢？这说明他们意识到，或者说承认了教育是资本。过去资本家赚钱是兴建工厂，买机器，可是现在他们感到了对技术的需要。除了添置机器、修盖厂房以外，还必须培养人才。第三，按照工业需要来设置专业。这是最早的专业划分。一般来说，专业是随着科学的进步和生产的分工来划分的。在人类历史上，社会的分工曾经促进了社会的发展和进步。有了科学社会分工的需要，作为人才培养的学校，也需要分工，于是就设置了专业。

（3）第三件大事就是美国的《莫利斯法案》和第三次工业革命。我们都知道，1862年美国林肯总统颁布了《莫利斯法案》，这是一个教育法案。为什么要立教育法呢？这也是为了适应当时新兴资产阶级发展的需要。这个法案规定，凡是有一名议员的州，都要拨出三万亩土地来兴办学校。这就从法律上保证了教育的发展。还规定，每个州都要大力兴办农学院、农机学院，办应用的工科学校。著名的麻省理工学院就是在美国的产业革命影响下成立的。这所大学在办学的宗旨上明显地不同于传统的大学，因为这些传统大学基本上是在英国殖民时期按照英国的传统兴办的。而麻省理工学院却是完全按照当时美国资产阶级的需要兴办的。这个学校从建校之初，所确定的宗旨就是强调应用。该校有一句名言，就是应用知识与掌握知识具有同等的重要性。因为以前的学校都是强调学习知识、掌握知识，而忽略知识的运用，麻省理工学院则不然，它强调应用知识。至今这一思想还是该校的特色。到了十九世纪末，美国还大力兴办州立大学。这也是为了适应当时生产力发展的需要，因为传统的大学已不适应当时生产力的发展了，不能为生产的发展提供足够的人才，所以就出现了州立大学。这种学校具有强大的生命力，因为它在办校的指导思想上不同于传统大学。它强调应用，强调综合学科，系科比较齐全，学费比较低廉，能适应生产发展的需要。州立大学的容量大，私立大学规模则

很小，如麻省理工学院在校学生不到一万人，而州立大学一般都超过三万，像俄亥俄州立大学就有11万学生、135个系，是美国“十大”（big ten）之一。所以这类学校刚一出现，就受到了企业界和广大青年的欢迎。这类学校有很大的自主权、独立权。二十世纪初，美国又出现了很多初级大学。第一所创立于伊利诺斯州。但它从1902年创建以后的四十多年内，却没有多大的发展。可是到了第二次世界以后，这类初级大学却似雨后春笋，得到了蓬勃的发展。到目前为止，已达一千一百多所，占美国高等学校总数的三分之一强。这是为什么呢？这是因为战后美国的工业出现了一个兴旺发展的时期，同时，许多军人从战场复员退伍回来，他们要上学，但超过了年龄；要就业，可又没有受过训练。怎么办？就上初级大学。现在这种学校已成了输送中等技术人才的一个组成部分，也构成了美国的高等教育特色之一。我们从美国高等教育的发展可以看出，它促使了第三次工业革命在美国的形成。

（4）明治维新和日本的经济起飞。日本前首相吉田茂写的《激荡的百年史》一书，篇幅不长，却简明扼要地总结了日本近百年来的历史，特别是总结了日本经济起飞的经验和教训。在近百年的历史上，日本一直是很重视教育的，这已成了他们优良的传统。日本国土很小，资源贫乏，它的土地只占世界的0.3%，可是人口却占世界的3%。在这样一个岛国为什么能出现经济起飞呢？直接答案还是教育的发达和智力的开发。日本明治维新后，提出向世界寻求知识，实行门户开放。为了面向世界，它对幼儿园教育都进行了改革，甚至规定幼儿每天要吃一次西餐。他们认为，如果不习惯于西餐，他们就不能到世界各地去，就会失去竞争，失去生存。日本是十分重视教育，重视智力开发的，从而导致了日本的经济起飞。

新的技术革命对高等教育的挑战

当前，全球性的竞争已成为一个严重的事实。无论我们承认与否，客观上这种世界范围内的竞争越来越激烈。各种竞争归根结底，都是智力的竞争。竞争的结果，往往是在相同的条件下，都以智力优先者取胜。技术革命的兴起，涉及到社会的各个方面，并对社会各个部分都提出了新的要求，也可以说是提出了新的挑战。譬如说对人才资源问题、人才政策问题、高密集的技术问题等等，都提出了挑战。为了迎接新的技术革命，我们必须迎接这个挑战，要研究我们的对策。

从当前世界情况看来，科学技术比较发达的国家，对于智力的开发，对高等教育的改革，都是十分重视的。这些国家改革的新动向，是值得我们注意的。

首先谈谈美国。目前，美国普遍感到教育危机，认为“美国正出现一种不求上进的思潮，这种思潮威胁到我们作为一个国家和民族的未来”。美国学者发出这样的议论，说明他们对教育改革极端的关注。美国著名的贝尔实验室的斯坎伦专门撰文，对政府不重视高等教育提出批评，他说：“如果美国要迎接这次新的挑战，工业界和政府就必须把加强高级技术教育放在头等优先的地位”。美国科学家指出：“在过去二十年中，美国对教育的战略意义认识不足，政府支持大大减少，这将是一种潜在的灾难，是一种带有全局性的错误”。为了改变美国科学教育每况愈下的状况，不久前，美国成立了“全国教育促进经济增长特别工作小组”，该小组由各州州长、白宫高级顾问、工业界领袖以及科学家组成，研究振兴美国教育的措施，制订教育促进经济发展的政策。

美国教育不景气的表现有二：第一，美国学生不求上进的思潮比较严重，只求赚钱，不要读书。大学质量低下。长期以来，把希望寄托在“人才引进”上面，据统计，近三十年来美国从海外引进二十多万人才，许多著名的科学家都是从外国引进的。第二，美国高等学校的教师纷纷离开学校，由教育界转入工业界，大学里目前物理、化学、技术学科方面师资缺乏，这主要与大学的工资制度有关。在美国，也是穷教授。可是日本就不一样，日本国民平均收入比美国低得多，可教授的工资平均比美国高，这是日本教育能够稳定的一个原因。

近年来，苏联对教育改革、开展技术革命也极为重视。为了鼓励科学发现和发明，苏联成立了“技术发现和发明家协会”。这个协会现有1200万会员，凡愿意促进技术进步的科学家、工程师和青年学生都可以参加。每年发明项目有9万件，技术革新项目有500多万件。仅1983年上半年就有12000项发明在国民经济上应用，创造财富达几十亿卢布。苏联政府指出，在本世纪内，应从根本上发展自动化、计算机和信息技术。苏联科学院院长亚力山大罗夫提出：“现在要开展一项有点象十月革命后消除文盲那样，甚至比那更为重要的工作”。

法国在去年下半年专门召开了“信息与教育”讨论会，参加会议的有政府与地方的高级官员，还有各方面的科学家、教育家。讨论的主题就是“教育与信息”的关系，教育如何适应新的技术革命的需要，教育如何适应信息化的需要，以及教育本身如何实现信息化。讨论会一致认为，当务之急是要尽快地把信息引进教育。

联邦德国教育部长威尔姆斯对未来的教育提出了十六点方针，包括高等教育的任务、敞开学校大门、学习结构和研究生教育等。

日本本来对教育是很重视的，但目前他们也感到有问题，主要是他们培养的人才、模式等方面也不能适应新的技术革命的需要。日本科学家大声疾呼，要尽快摆脱培养模拟式人才的道路，而要培养创新的人才。尽管日本教育经费已经很高，最近，他们讨论决定继续追加教育经费，要提高教授的工资。日本政府制订了“科技白皮书”，强调加强计算机软件、超大规模集成电路、卫星和光纤通讯研究，大幅度增加科研经费，以促使科学技术进步。1982年日本决定设立“日本奖”，这是一个国际性的奖，其目的就是为了吸引世界著名的科学家及其成果，并以此来激励和促进日本人的发明创造。日本奖的金额相当于诺贝尔奖金。

加拿大也比较活跃。前不久，加拿大政府专门委托蒙特利尔大学进行改革试点，中心内容就是如何使加拿大的高等教育适应新的技术革命的需要，如何培养创新的人才。政府希望该大学提出一整套高等教育改革的方案，课程设置的方案。为此，蒙特利尔大学召开了十次讨论会，制定了三个咨询报告。加拿大去年还召开了“加拿大明天”的讨论会，研究如何迎接新的技术革命。

此外，在英国、澳大利亚等国都进行了许许多多的讨论，都在密切注视这个动向，酝酿各自的对策，以加强在新的技术革命中的竞争能力。

当前新的技术革命对我们国内的高等教育到底提出了哪些新的问题，或是挑战？这个问题涉及很广，可以说新的技术革命对我们高等教育的各方面、各个环节，都提出了挑战。应当承认，我国高等教育的各个方面都有一个不适应的问题。我们的教育思想、教育过程、教材、教学方法、考试制度、升学制度、管理制度等都还有不适应的地方。

不仅不适应新的技术革命的挑战，而且也还不适应我国当前的"四化"建设。归纳起来，新的技术革命对我们提出了如下五个主要方面的挑战。

（1）是对传统的教育思想的挑战。我国是一个历史悠久的国家，在世界上具有举足轻重的地位，享有很高的威望，被称为"文字的国家"，也被誉为"教育之乡"。欧洲古老的大学也只有八百年历史，我们如果从"四大书院"算起，高等教育已有千年之久。在古代，我国有着优良的教育传统，也曾经有过教育的兴盛时期。但是到了近代，自明朝以后，我国的技术落后了，主要的原因恐怕在于教育落后。教育落后的主要原因是封建社会太长，教育长期受封建思想的束缚。就从当前来说，我们的教育思想在很多方面还残存着封建主义的教育思想的影响。

从国际上来看，近代高等教育大概有三百年的历史。目前高等学校的一整套体系，不论是中国或是外国，基本上还是第一次工业革命时形成的模式。三百年以来，虽然不时有所变化，但是不大，没有从根本上触及。我国高等教育除受外国近代高等教育的影响外，还加上封建的传统的教育思想的影响，就更显得不适应新的技术革命。

讲传统的教育思想，并非是说传统的都不好。传统有优秀的传统，也有保守的传统。我们说破传统的教育思想，也不是笼统地要否定一切，而是要否定和破除那些保守的、落后的、手工式的教育的那一套。

什么是落后的传统教育思想呢?主要之点就是教育的目的问题。在传统的教育思想看来，教育就是"授业、传道、解惑"，这是韩愈对教师下的定义。这实际上成了我们学校的教育目的，把学校仅仅局限于为一个传授知识的场所。教学成了学校唯一的功能和目的，这便是落后与保守之所在。现在的教育思想已经对传统的教育思想提出了挑战，这就是说，仅仅是传授知识的单功能已经不够了，不能适应现代社会的需要。按照现代教育的观点，大学的任务是什么呢？其功能是什么呢？是否可以归纳为六点：第一点，培养合格的大学本科生，培养普通的、各类学科的专业人才。第二，开展研究生教育，培养高等的专门人才。第三，开展回归教育，或是终身教育，摆脱一次教育的模式，变成二次的、多次的、终身的教育，提高师资水平，为企业界培养各种熟练的专门家。第四，大力开展科学研究，完成国家的重点科研项目，充当科研一个方面军的作用。第五，要负责促进社会的进步和经济的发展，实行学科与生产的联合体。前几年，世界经济危机中，美国的许多工业出现倒闭、萧条，但唯独只有地处加州斯坦福大学旁边的"硅谷"及周围的一些企业，保持不衰，其原因，就是"硅谷"具有强大的智力作为后台。以斯坦福大学为中心的旧金山地区的十几所大学，都与"硅谷"建立了联合体，这样，资本家尝到了甜头，大学得到了好处。由此可以看到一种发展的趋势，今后大学要实行开放，建立联合体。第六，要普及科学技术，要为社会主义精神文明建设、为提高全民族的科学文化水平服务。从以上这些大学的任务来看，我们目前的大学，它的功能，已经远远地跳出了仅仅只是传授知识这个单功能的模式，而发展为同社会、同各个部门有着密切联系的多功能的教育机构。

（2）是对人才培养的规格提出了挑战。当前，世界范围内普遍关注的一个问题，就是大学究竟培养什么样的人才？当代社会需要什么样的人才？这不仅是教育学家们研究的问题，而且是社会共同关心的一个问题。有人对日本和欧美教育做过一个比较，其目的在于研究应当培养什么样的人。这个比较是从四个方面进行的：从教育目的看，日本

的教育是注重知识的积累，而欧美的教育强调开发和创造；从教师的立场来看，日本教师强调教育（teaching），把教师和学生看成是一个输入和输出的关系，仅仅向学生输出知识。欧美是强调启发（education）；从学生立场看，日本学生强调记忆，强调死记硬背，欧美的学生强调思考；从教育特征来看，日本的教育特征可归纳为“知识渊博，善于模仿”，欧美的教育特征是“自由思考，勇于创新”。这一对比恐怕有一定的道理。日本人时间概念很强。过去，资本主义国家有句名言，叫做“时间就是金钱”（time is money）。现在又提出了“主义”或“信息”就是金钱（idea is money）。这就说明，在当代谁掌握了发明创造的智力，谁就能在科学技术上领先。这就是要重视培养创造能力的道理。

（3）是对旧的教学内容的挑战。新的技术革命与目前的教学内容之间发生了矛盾。这个矛盾就是在面临所谓“知识爆炸”的情况下，如何在有限的教学时间里，让学生获得最有用的知识。这就是新的技术革命给我们提出的一个新课题。当代知识急剧地增加，也急剧地淘汰。据未来学家统计，在当代每七年到十年，技术科学知识要淘汰百分之三十，电子学知识方面十年淘汰百分之五、六十。一个大学生在校学习四年，等到毕业，所学的电子学知识可能会淘汰百分之二十五。因此，大学到底应该教什么？马克思曾经说过：“科学教育的任务是教学生去探索、创新，要给学生一支猎枪，而不是仅给一袋干粮。”因为干粮吃完就会饿死，有了猎枪就会用它寻找食粮。我们教学生仅仅教给他一些现有的知识，还是教给他一些方法，让他去探讨，寻求新的知识呢？我们教师正面临着这种选择。笔者认为，回答应该是后者。我们应当向学生传授最基础的知识，最基本的工具和方法，使学生掌握这些最基础的理论和方法以后，就能去扩大自己的知识范围，去开辟新的知识。传统的教育思想只知道传授知识，而忽视能力的培养。当前教学存在的问题颇多，教学内容陈旧、庞杂、零乱，教学体系陈旧，学生负担过重。如政治经济学，目前的课程体系和课程内容，大部分是苏联五十年代那一套，苏联现在已经改革了，而我们还抱着那个体系不放，我们经济学的教学还停留在定性的描述，宏观的描述。最近，武汉大学一位在国外的博士研究生反映，国内经济学教学的内容太落后。据他统计，国内在美国学经济的大约有六十多人，其中很多人听不懂课，无法学下去。与其说在美国学经济，不如说是学数学，在国内这些学生只学了很少一点高等数学，甚至根本没学，当然听不懂。这就说明我们的教学很不相适应。如果不更新，培养的人就不能适应需要。正如一个工厂不管使用只管生产，这就会造成很大的浪费。

如何改革？笔者认为，就是要对现有的教学体制、教学内容，进行一次大胆的革新，要勇于创新，把新的技术革命的成果吸收到教学中来。同时，还要研究，到底应当教什么？希望教师和学生们都来研究和回答这个问题。

（4）对旧的教学方法挑战。方法很重要。所谓方法，就是指人们认识事物的途径和道路。遇事方法得当，可以获得成功；相反，方法不当，就会遭到失败。毛主席对方法与任务的关系作过论述，他把方法比喻为过河和桥的关系。教学也要讲究方法。但是现在的教学方法太落后，完全是一种过了时的、落后的、手工式的教学法，也许这是极而言之。但是，严重的是这种现象还不被人们所重视，年复一年，津津乐道地在那儿教。这种落后的教学方法可以归纳为“三中心”问题，即以课堂为中心，以本本为中心，以老师为中心。这种“三中心”就是一种落后的教学方法，应该破除，应该改革。

当然，也不能绝对化，否则，就会走向反面。并不是说破课堂中心，就不准上课了；破以老师为中心，就不要老师了，等等。

我们有的教师现在只管教书，不研究教学法，这是一个很大的问题，这是综合大学长年形成的一大弊病。很多教师对教育学、心理学、未来学、人才学一概没有兴趣，只管教他的专业课，而不研究如何教，这是不行的。目前，我们老师的分工越来越窄。历史系有的教古代史的教师不能教完古代通史，这是不合理的。当代科学相互渗透、相互结合，连古代历史各断代都不结合，还能与别的学科结合吗？其结果，培养的学生只能与老师自己一样，不可能有广博的知识。同样，在古代汉语等其它学科都有这样一种情况。在教学当中，犹如铁路警察，各管一段。老师也有很多的习惯势力，如对学生不听课比较反感，往往把学生不听课与不尊重自己联系在一起。笔者认为，听不听课与是否尊重老师没有必然的联系。当然，对个别调皮的学生，我们应当教育。对于不听课要作具体分析，有的人是懂了，没有必要去听，尤其是社会科学，更应当提倡自学。有一次，笔者听一位老师讲解一个设备，花了两课时，结果学生还是不大懂。为什么不能用一个幻灯片，或带学生参观一下，这比抽象地讲两堂课效果要好得多。因此，要承认我们教学法是落后的，一定要改革。

另外，考试方法也很落后。现在是以分数取人，以“分”量“才”，看来这是会埋没人才的。如果以分取才，恐怕丘吉尔也就当不了首相，因为，他在校学习成绩不佳。“高分低能”的情况不少，应该说，分数并不代表一个人的才华和能力。这个问题也要改，但实际情况很复杂。围绕着如何看待分数，曾有争论。武汉大学有个学生，发表了不少作品，作品的水平有待提高，但毕竟她写了不少的东西，应该说具有一定创造能力。但是对待这个学生看法不一致。有的说，这个学生成绩不怎么样；有的说，这是一个优等生，是个有创造力的学生。值得注意的是，那些喜欢搞业余研究的学生，往往遭到非议，被认为是不好好读书的。对那些向边缘学科发展的学生，也被认为是个不务正业的学生。我们培养有创造力的学生就是需要这种人，应该鼓励学生业余创作，鼓励学生向边缘学科发展，使其具有综合的知识。

（5）是对教师知识结构的挑战。对于学生来说，内因是决定成才的主要因素，外因是为辅的。但是从教与学的关系来看，教师对学生是起主导作用的。我们要求学生有创造力，首先老师要有创造力；我们要求学生有合理的知识结构，首先老师要作到有合理的知识结构；我们要求学生有渊博的知识，老师也必须要有渊博的知识。当然，这不是说老师是万能的。在历史和现实中，青出于蓝而胜于蓝的事例很多。但是，作为一个合格的老师，要求学生作到的，老师必须首先作到。当前，确有不少的老师的知识结构不合理。譬如说，我们绝大多数老师不会使用计算机，不懂算法语言，我们怎么能适应新的技术革命的需要呢？再譬如说，我们现在要求文理科相互渗透，但是文科老师基本上不懂自然科学；理科的老师对哲学、经济学和管理学等毫不感兴趣。理科老师没有起码的文学修养和管理知识也是不行的。我们老师的知识面这么狭窄，知识结构单一，很难适应未来的需要。这种局面不改变，将来就难以承担教学和科研任务。这里有一个问题，即有些老师以自己科研方向代替专业方向。比如搞历史研究，科研方向可以选择某一断代或某一历史人物，钻深钻透，但是教学就不能这样干。如果说大学的教师略胜科学院的研究人员一筹，那就在于教师长年从事教学，基础理论比较雄厚，而研究人员多

年研究一个专题，虽然钻得很深，但知识面不宽。

在教学中，还要把教师个人的兴趣和学生的兴趣分开，不能让学生仅仅局限在教师的学术领域内。我们的教师有一个再学习的问题，不能认为只专一门知识就够用了，要改变自己的单调的知识结构。如何改变呢？一要打好基础；二要向边缘学科渗透；三要做好研究工作。尽管各校的条件不一样，但一定要尽量创造条件去作。“不入虎穴，焉得虎子。”我们自己不搞科研，怎么培养学生的独创精神呢？自己不知道如何选题，如何搜集资料，如何撰写论文，又怎么能够指导学生呢？科学研究并不神秘，科学研究的课题就在我们的周围。俗话说：留心处处皆学问。有些人能把握住发明机遇，作出了惊人成绩，有些人坐失良机，科学发明从眼皮底溜过去也未被发现。这样的事例是屡见不鲜的。至于说条件，完全要靠自己去创造。湖北黄冈地区经委的青年干部陈保全，是自学成才的。他勤奋学习，刻苦钻研，写出了四十万字的《质量经济学》专著，他的论文被接受参加国际经济学讨论会。论条件，陈保全不比我们好。为什么他能作出甚至连大学教师也作不出的成果呢？主要是因为他具有强烈的求知欲望，具有强烈的事业心和创新精神。

教育必须面向未来

“教育要面向现代化，面向世界，面向未来。”高度概括了当代的教育思想，是我们进行教育改革的指导思想。我们应该深刻领会，把“三面向”的思想贯彻到我们教学的各个环节中去。

如何理解“三面向”呢？笔者以为，这三句话是相互联系的，但又各有所侧重。

“面向现代化”，主要讲的是教育与经济建设的关系。教育必须为四化建设输送足够数量的合乎质量的建设人材。教育的发展速度必须与建设的发展相适应，与四化建设的战略重点相吻合。

“面向世界”，讲的是中国与外国的关系，包括中国教育与外国教育的关系。这里面有两层含义：一方面，我们要吸取和借鉴外国教育的经验；另一方面，我们的教育也要敢于竞争，要赶超世界的先进水平，迎接世界教育和新的技术革命的挑战。

“面向未来”，是从未来学的角度提出问题的，是讲今天与明天，现在教育与未来教育的关系。俗话说：“十年树木，百年树人”。教育要走在经济建设的前面。培养人才不能是“临渴掘井”，只能是“未雨绸缪”。一般来讲，一个科学家从大学毕业到成材要15年以上，因此我们的教育要走在前面。如果说，未来是所谓“信息时代”，那么现在就应当着手为“信息时代”培养人才。

如何实现“三个面向”，涉及的内容很多。这里侧重讲高等教育如何面向未来的问题。笔者试图以未来学的观点探讨新的技术革命对教育的影响，谈谈对未来教育形态和特征的看法。那么，未来的高等教育到底是个什么样子呢？归纳起来，是否可以说，未来教育具有以下五个特征：

（1）从现在的职业教育发展到终身教育。所谓终身教育，这里有双重含义：其一是说从一次教育到多次教育；其二是说从为谋取职业到为建设精神文明的需要，到那时，教育不再是为了谋取职业的手段。自教育产生以来，都是为了谋取职业的需要。所以，从来的教育都是职业教育。现在就业的一个主要渠道就是就学。在我国的条件下，

受过专业训练的人，在就业人数中所占的比例还很低，职工的素质还比较差。这是我国企业管理不善，劳动生产率不高的主要原因。当前，在我国不是削弱职业教育，而是要大力发展职业教育。不仅要加强高等职业教育，而且还要大力发展各种形式的中等职业教育和业余的职业教育，以改变不合理的教育结构，适应四化建设的需要。

但是，从未来社会来看，教育的概念将发生变化，职业教育的功能要削弱，而“二次教育”、“终身教育”将得到发展。为什么会出现这种现象呢？这是因为：第一，随着产品的竞争和知识更新，所有职工都有一个再学习问题，这就产生了对“二次教育”的需要。第二，劳动生产率极大地提高后，职工的劳动时间将大大地缩短。除了文娱活动以外，再次接受教育，将成为广大职工的工余活动之一。第三，随着医学科学的进步，人的寿命越来越长，但退休年龄将提前。大量退休的人作什么呢？如果不恰当地安排，不仅他们自己失去了生活的依托，而且将导致成社会问题。也许教育是解决这一矛盾的好办法。事实上，在发达的资本主义国家中，终身教育已获得了较大的发展。例如，在西方国家中，七老八十的大学生已是屡见不鲜了。他们不是为职业而受教育，而且当作一种爱好。随着新技术革命的发展，这种终身教育的比重将越来越大。

（2）从义务教育发展到教育成为第一需要。什么是义务教育？义务就是带有强制性的，是必须要作到的。以此类推，义务教育是带有强制性的教育。它在历史上，对社会进步起了极大的促进作用。教育为什么要用法律的手段来实施呢？这是为了社会发展的需要。欧美国家和日本都是较早地实行了义务教育，这是适应他们当时经济发展的需要。义务教育是逐步发展的，首先是初级义务教育，现在发达的国家已经实行中等义务教育，但至今尚未发展到高等义务教育。我国由于经济力量不足，直到第五届人大第五次大会才决定普及初级义务教育。义务包括两个方面的内容：一是国家要承担义务，即承担学生的学费，有的甚至承担学生的全部费用；二是家庭要承担义务，儿童到了学龄就应去上学，否则家长就要受罚。这是现在的情况。到了生产力高度发达的信息化时代以后，强制性逐渐消失，教育将成为自觉的活动，即教育将成为人类的第一需要。马克思提出，到了共产主义社会，劳动将成为第一需要。这里有两个前提：人的思想觉悟要极大地提高，人类的物质要极大地丰富，实行“各尽所能，按需分配”的原则。现在的劳动也是带有强制的，因为现在没有这种强制性还不行。将来，劳动成为第一需要，与劳动相适应的教育也会成为第一需要。第一需要就是自觉自愿的，没有强制的。那时，受教育不再是苦事，而是一种乐趣；某些科学实验不再是神秘的事情，而是一种游戏。这并不是天方夜谭，而是可以实现的。譬如说许多人学习计算机，并不是为了职业，而是出于兴趣，为了家庭生活方便。上一世纪的许多科学发明，在当时曾是科学家们孜孜以求的研究课题，而现在有些已成为儿童玩具，变成了游戏。现在到南极去考察是冒险，到未来的某个时候，人们将到那里去旅游。第一个宇航员是划时代的英雄，现在已有几千名宇航员，并且已经能在太空中行走，将来将开创人类到宇宙旅行的新纪元。

（3）从手工业方式发展到工业化、信息化。何谓教育的手工业方式？即个体式的，自给自足的。我们现在的教育尚处于手工业的和半工业化的状态，将来要走向工业化和信息化。工业化是与手工业相对而言的，大学犹如工厂，不同的是，工厂生产的是物质产品，而学校生产的是知识产品。教育的工业化，是指要摆脱家庭式或师傅带徒弟

的培养方式，把教育纳入学校，批量培养人才。国外四十年代已经提出了教育工业化这个口号，国内很少使用这个提法。目前，大学部分地实现了工业化，但是还有一部分停留在手工业方式上。据统计，现在美国大学共有2500个专业，也就是说只能生产2500个规格的“产品”。据统计，美国社会上有14.9万个职业。这就是说，世界上还有很多职业没有纳入学校的培养轨道。那么这些职业的人材从何处来呢？一是转行，从其它行业转过来；二是自己培养自己。由此看来，许多职业没有学校教育化，即没有教育工业化。因此，还需要发展新专业，扩大教育工业化的范围。专业与社会分工的需要是相适应的，社会有什么需要，学校就相应设立什么专业。譬如说，当前政治思想教育薄弱，政工干部后继无人，所以设立政治思想教育专业是非常必要的。事物总是发展的，社会是不断进步的，不能以旧眼光来对待新专业的设置，任何事物都是从无到有。如果按照传统的学科观念，那么工商管理、财务管理、会计、秘书等等都不像是专业，但实际需要那么迫切，我们还不应该设置专业吗？图书馆教育事业为什么长期发展不大呢？就是因为得不到重视。图书馆学最初是在美国哥伦比亚大学发展的。该校图书馆长杜威，看到各行各业都有学校培养人才，唯独图书馆员自己培养自己，没有学校培养。于是，他就创建了图书馆学院。现在，我们的专业不是多了，而是太少了，我们要努力创办新专业，改变教育的手工业方式。现在还有许多专业都是采取师傅带徒弟的办法，如炊事员、木工、水工、修理工等，为什么不能工业化、学校教育化？

再谈教育的信息化。我们要把新的技术转移到教学中来，促进教育发展。卫星教学，闭路电视教学，广播电视大学都可以算教育信息化。不搞教育信息化，我们不能满足四化建设的需要。可以框算一下：我们国家要实现信息化，那么就业人员的半数应该有大专文化水平，即一亿职工中要有5千万大专毕业生，现在只有830多万，还差4千多万。到本世纪末还有16年，这么多人怎么培养？按照现有的学校模式，根据现在的框框，是没有办法的，必须实行教育信息化。我国还不能马上办立体教育，但是电视、广播教育还是可行的。自学考试也要大力推广，采取多种形式发展教育事业。

（4）教育从集中发展到分散。回顾一下教育发展史，教育是从家庭教育发展到学校教育的。在社会发展历史上，这是一个进步。但是，事物的发展往往是按照螺旋式循环方式进行的，看来未来教育又要由大到小，由集中到分散。这也是符合事物发展规律的。在第三次工业革命时，一切追求大，工厂从小到大，直到托拉斯、跨国公司，巴黎的埃菲尔铁塔就是大工业的象征。计算机的生产，也是越来越大。教育与工业也是相适应的，摆脱家庭教育以后也是向大型的方向发展，如国外数万人的大学不少。将来随着工业发展的变化，教育肯定也会发生变化。未来的社会是由集中到分散，那么作为与它相适应的教育，也将从集中到分散。过去知识的密度不大，教育集中在大城市。现在靠信息，交通方便，信息时差不是悬殊，所以就不必集中了。随着社会形态的改变，教育也会由集中走向分散。“信息时代”还有一个特征就是小型化。例如美国IBM公司历来是搞大型计算机，反对搞微型机，但是现在的时代潮流不可抗拒，它又不得不回头来搞微型机。所以，现在又以小为美，普遍存在一种追求精小的趋势。

将来的教育，将由集中到分散，由单一到多样，不断发展。在未来的信息化时代，将来的家庭就可能是一个教育单位。计算机进入家庭后，一按电钮，就可以上课了。笔者在美国看到一个化学实验室，教学的全部内容都存贮在计算机里，复习题、考题、答

案全部在计算机里。该实验室有45个终端，同时要容纳45个学生，上课时，把电钮一按，教学内容就显示在屏幕上。这种实验室将来就可以搬到家庭里去。所以，未来教育的发展是由集中到分散，由单一到多样化。

（5）由单功能向多功能发展。学校的功能是由它所承担的任务而定的。现在的学校，多数还是单功能的。但是，也有一部分学校摆脱了这种模式。例如在美国，有的学校专门搞教学，有的学校是科研与教学并重，有的学校则是以科研为主。中央领导同志曾提出大学要办成两个中心，这是完全正确的。这样可以摆脱学校单一的模式，向多功能发展。

为什么单功能的学校不能适应新的技术革命需要呢？一方面，单功能影响到培养人才的质量。学校不搞科学研究，不能提高教师的水平，不能充实新的科学知识，也就不能培养具有创造能力的人才。另一方面，单功能将影响到学校与社会的联系，将使教育与生产脱离，那么学校在激烈的竞争中，就会站不住脚。

在新的技术革命影响下，未来的社会将是多样化的社会。由于信息化的作用，许多关系将重新调整。与多样化社会相适应，教育也将是多功能的。过去，曾提出过“教学、科研、生产三结合”，这是正确的。三者是辩证统一的，同时又是相互促进的。在未来的大学中，教学、科研、生产将是三个主要功能。也许，这种三结合的体制，就是信息化时代大学的模式。这就是说，到那时，学校将成为一个多功能的实体，既可以培养人才，也可以开展科学研究或进行生产。这并不是空想，事实上正在朝着这个方向努力。国内一些重点大学，除了教学以外，还设有研究所和工厂。教学、科研、生产三结合，不限于大学内部，也包括社会上的企事业单位。同样地，某些研究所也有附属工厂，研制和生产一些知识密集的产品；某些工厂也建立了研究所，实行开发产品与开发智力相结合。教学、科研、生产的互相渗透，将促使大学、研究所和工厂三结合体制的形成。这一体制的建立，可望使我国的高等教育事业出现大发展、大普及的局面。

目前，新的技术革命已经兴起，并且向我们提出了挑战。正确的态度应当是，要正视它，研究它，利用它。我们研究它的目的，是为了总结历史上技术革命的经验教训，研究技术革命与教育改革的关系，分析技术革命与经济社会发展的规律，从中找出供我们借鉴的东西，并制订相应的对策。

刘 道 玉

四 化学方法论

(一) 化学方法论概述

1. 化学方法论研究的内容和意义

化学方法论是关于化学一般研究方法的规律性的理论。将化学方法论放入科学方法论的层次系列中来看，它是属于中间层次的一般自然科学方法与低层次的化学科学方法交叉结合和相互渗透的产物。一方面，它是把哲学方法、一般自然科学方法运用于化学运动，同化学学科的特点紧密结合，在形式上把它独立出来，作为一般自然科学方法论的一个方面；在内容上较一般自然科学方法论深入和充实；在表述上较一般自然科学方法论精确和具体。另一方面，它又是对化学学科中所共有的、通用的方法进行抽象和概括，并用这些经过抽象和概括的方法来丰富、发展和深化一般自然科学方法。

人们在化学研究和教学中，除了使用科学仪器等物质手段外，还必须使用化学方法这种思维工具。化学方法贯彻于化学认识过程的始终，无论是化学认识的感性阶段和理性阶段，还是由理性复归到实践的阶段，都离不开化学方法。为了丰富、发展马克思主义哲学及自然辩证法；为了促进化学研究和教学的顺利发展，研究化学方法论已经成为十分必要。开展化学方法论的研究，需要正确地认识研究化学方法论的必要性；探讨化学方法论的基本内容；阐明研究化学方法论的指导原则等重要问题。

研究化学方法的必要性

化学方法论不是化学发展历史的自然形态，而是从中提炼、上升已经规范化和程序化了的逻辑体系，因此，它反过来对化学的研究和教学起着推动和指导的作用。尤其是对当代迅猛发展的化学来说，化学方法的正确运用，是化学研究能否取得成功的关键。因此，我们应该结合化学学科的特点，着重从理论上及总结历史的经验、教训上阐明其必要性。

从理论上来看，化学方法论是化学研究的锐利武器和有效工具。

首先，化学方法论是哲学和化学科学之间的中介和纽带。

与十九世纪相比较，现代化学具有从宏观向微观、从静态向动态、从定性向定量、从描述性向推理性过渡等的特点。这些特点表明，现代化学的发展一步也不能离开理论的思维，同时还需要有正确的哲学观点作指导。我们知道，哲学只能为自然科学指明总方向和总途径，化学方法论则是哲学到化学科学的中介和纽带，它从一个方面把哲学对自然科学的指导加以具体化。例如，化学实验既是化学认识的来源，又是检验化学真理性的标准。根据化学实验方法不断发展的历史和现状来看，就可以指明化学的一些分支在今后相当长的历史时期内，仍然是实践性很强的学科，而且新的实验方法和手段还继续可能为化学开辟新的领域。又例如，演绎方法是使零散的、不完整的知识纳入理论体系的有效方法；结合化学发展的历史和现状来看，建立演绎构造体系也是化学发展的一

个方向。化学原有一些属于归纳构造体系的分支学科如有机化学等，也会逐渐向演绎构造体系发展。再例如，根据现代科学方法统一化、综合化的特点和趋势，结合化学的现状来看，一方面，化学的进步仍得力于物理学的理论和方法；量子化学、化学统计力学等是大力发展的学科。另一方面，化学的理论和方法与生物学相互渗透的结果，不但推动了生物学的前进，而且还会使化学学科出现新的生长点等。总之，化学方法论对确定化学研究方向、选择科研课题和探索化学新的分支学科的生长点等，都起着促进的作用；同时，历史上的多次化学革命总是与化学方法的变革相联系着的。我们可以在一定意义上说，化学方法推动着化学的进步。

其次，化学方法论为化学研究提供科学的工具、手段和步骤。

这一方面的内容十分丰富，还有待人们深入发掘和总结，结合化学学科的特点来看，主要有下面的表现。

（1）为化学研究指明认识活动的程序，使认识过程规范化。

一般来说，认识活动的程序总是从问题开始，确定研究对象，建立科学的理论，检验所获得的结果的真理性等。化学研究也总是按照这个活动程序向前发展的，化学方法则是这种认识活动程序的具体化。认识的每一阶段或环节都存在方法的问题，如提出问题就要运用假说的方法；但要提出科学的假说，还必须以一定的实验材料和经验事实作为基础，所以观察、实验又是提出假说的基础。假说转化为理论是一个极其复杂的过程，其中首先有一系列的逻辑检验过程。在演绎检验的过程中，演绎与归纳、综合与分析等方法又相互结合起来使用，并且仅当逻辑上的论证又得到实践检验其正确性时，假说才转化为理论。化学家们如果能正确地掌握和有效地运用上述程序，就可以在研究工作中得到事半功倍的效果。

化学方法论不但提供了系统而全面的逻辑思考步骤，而且还提示人们注意科学研究中随时出现的一些非逻辑因素，如直觉、灵感、科学幻想等等。

（2）揭示出化学理论本身具有的方法功能。

一个化学的范畴、理论、规律形成以后，无疑对于人们认识自然和改造自然都会起到重要作用。然而，由于范畴、理论、规律本身仅是一些相对真理，只能在一定条件下和一定范围内有效，离开这些条件和范围就会失去作用。随着化学历史的向前发展，原有范畴、理论、规律的局限性还会暴露出来。但是，当人们用原有范畴、理论、规律用来探索未知时，它们就转变为方法，起着探索未知的方法的作用。这种方法与原有范畴、理论、规律相比较，其作用则是长远的，其适用的范围和有效性比原有范畴、理论、规律要大得多。例如，十九世纪中叶所建立起来的分子结构的经典理论，到二十世纪初就暴露了它的历史局限性。然而，它所确立的“结构”范畴，以及根据分子结构可决定分子的性质和通过分子的性质可推测分子结构的基本理论，却转化成为研究化学分子结构的方法，对于现代化学键理论的发展和实践的发展，都起到科学方法论的指导作用。所以，化学方法论可以帮助化学家学会把自己的研究成果转化为科学的方法，使它在新的研究中起着某种“路标”的作用。

（3）为化学理论体系的建立提供科学的表述形式和方式。

化学方法论在化学认识中的作用，除了直接涉及化学理论的客观内容外，还要涉及化学理论体系的构造形式和表述方式。这样，在某种意义上说来，形式化的方法在化学

认识中也是有一定作用的。形式化方法通过使化学理论定量化、精确化和规则化的途径，来提高化学理论的普适性，从而有助于人们更好地认识化学运动的内容和本质，更好地发挥理论的作用。例如，将热力学第二定律的判别式 $dS>0$，$dS<0$，$dS=0$ 转化为 $dG<0$，$dG>0$，$dG=0$ 之后，则大多数实际的化学反应的方向和限度问题才得以解决，所以，$dG<0$，$dG>0$，$dG=0$ 的表述方式就具有更为重要的方法论意义。

同一种理论，可以有不同的表述形式，这些不同的表述形式本身都起着不同的方法的作用。例如，化学元素周期表是化学元素周期律的表述形式。元素周期律的表述形式除常见的长式表、短式表外，还有塔式（汤姆逊一玻尔式）表、三分族式表等，这些表述形式本身就有着不同的方法论功能，每一种具体形式都在对应的化学运动的某种属性和关系的研究中，起到特定的科学方法的作用。探索化学理论体系的表述形式和方式的方法论问题，这是摆在我们面前的一个任务。

此外，从化学发展历史的经验教训来看，化学方法论有助于化学家少犯错误、少走弯路和摆脱形而上学的束缚。

从方法论的角度来看化学史，化学史也是一部充满了正确的科学方法和错误方法之争的历史。在两种或多种的假说、理论之间的争论中，必然包含着方法之争；在一种假说、理论的自身发生、发展过程中，也可能存在着方法上的差异。总结化学史上围绕理论争论中的方法问题上的经验和教训，对于我们正确认识和掌握化学方法论有着现实性和迫切感。其中，反面的教训更能揭示问题的实质，更能吸引人去思考和总结，这一方面的历史教训也很丰富。

总之，正确运用化学方法论，就能有助我们科学地对待各种理论学说及其关系，善于总结历史的经验和教训，取众家之长，补己之短，少犯错误，少走弯路，缩短获得科学研究新成果的行程。

化学方法论的基本内容

化学方法论的内容十分丰富，有许多地方还有待人们去开发。大致说来，有下面一些主要内容。

总论性研究。这是指把化学方法论作为一个整体来研究，并且其中要突出化学学科的特点。这方面的研究主要有：

（1）研究化学方法论的整体的逻辑结构体系。例如，总体结构由哪些方法组成，其间联系的环节如何？观察、实验、逻辑思维、假说、理论等的相互关系如何？它们分别在整体中的地位如何？整体的性质和作用如何？

（2）化学认识活动程序的规律性如何？作为正确的化学认识，应符合怎样的认识程序和操作步骤？一般的化学研究过程有什么特点？

（3）研究化学认识过程模式及其规则（评判合理性的标准）。化学认识过程有无形式规则？哪些方法可以形式规则化？哪些方法目前还不能形式规则化？

（4）现代化学研究方法综合化、统一化的特点、趋势和规律如何？

分论性的研究。这方面的内容很多，主要有：

（1）研究一般自然科学方法，如选题方法、观察、实验、逻辑方法、模型方法、

假说、理论方法、数学方法等，在化学学科中的特点、作用和适用范围等规律性问题。如以实验方法来说，学术界对化学实验存在着不同的看法，我们通过对化学实验方法规律性的研究，就有助于争论的深入，使科学工作者正确认识实验方法在化学中的性质、地位和作用。又例如，化学理论思维方法的特点是什么？它与物理学和生物学的理论思维方法有哪些异同？等等。

（2）从化学学科的基本概念、范畴、理论、规律，以及化学理论的构造形式或表达方式中，抽象和概括出新的科学方法。正如前述，人们把化学中的基本概念、范畴、理论和规律用来探索未知时，这些概念、范畴、理论和规律就转化为方法，起着方法的作用。从现有的化学理论构造形式来看，有归纳形式、演绎形式和归纳、演绎两者兼有的形式，这些构造形式本身都具有深刻的方法论意义。如何概括和总结化学中关于这个方面的科学方法，这还是科学方法、科学逻辑研究的任务。

（3）研究低层次方法向高层次方法提升和抽象的问题。

科学方法在现代已经形成一个层次分明的严密体系：其最高层次为哲学方法，中间层次是一般自然科学方法，低层次则为各门自然科学特殊方法。三者之间是一般、特殊、个别的关系。科学方法的这种层次关系并不是绝对不变而是可变的，随着时代和条件的不同，科学方法可以发生提升的现象和过程。这一点在化学方法论研究中也引起了人们的关注。

例如，通过对定性和定量分析方法的研究，使其上升为一般自然科学方法甚至一般社会科学方法。又例如，通过对化学热力学、量子化学的普适性研究，扩大和发展它们成为生物学和生态学中的方法等。

（4）从化学家的科学活动中总结出科学方法。化学认识是人们对化学运动形式客观规律的反映，化学家是人类认识化学运动的主要力量，所以，在他们的实验记录、研究总结、著作、回忆录、传记、手稿和报告讲演中，就必然蕴含着丰富的方法论的素材。

横向研究。大体包括两个方面：

（1）研究新兴科学技术、现代物理、现代生物的理论和方法，对化学学科带来的重大方法论的作用。例如，现代高速电子计算机的使用和"三论"的出现，给化学学科带来哪些重大推动作用和影响？给化学学科方法论带来哪些变化？对化工生产的方法带来哪些重大变化？又例如，现代物理学的理论、方法以及仪器的发展，给化学、化工的理论和方法带来哪些重大作用和影响等？

（2）研究化学方法论对化学教育的作用和影响。国外已有人把科学方法引进教学，促进了教育方法的一系列变革，这就是所谓"程序教学法"的出现。"程序教学法"是根据控制论原理，把教师、学生和所学知识看成一个教学系统，对系统实行最优控制，从而达到最佳的教学效果。"程序教学法"十分注意科学方法贯彻于每一个教学环节，其目的在于培养学生的观察力、想象力、思维能力和创造才能。在化学教育中如何贯彻"程序教学法"，这也是值得研究的重要题目。

还有，化工生产、化工技术开发中的方法论研究，它涉及：

（1）化工生产、化工开发中的科学方法是一般化学方法的应用和深入，它有哪些特点和规律性？

（2）一般化学方法与化工设备、仪器相互统一关系的研究。人类对化学认识的工具，实际上可分为两大类：一类是思维工具或主观手段，这就是所谓化学方法论。这是科学认识工具中的“软件”部分。另一类是用于完成观察、实验、测量、记录等任务的装置和设备等物质工具或科学仪器。科学仪器是一种物化手段，是科学认识工具中的“硬件”部分。这两部分在人类的科学认识活动中是相互联系、相互结合、相互补充和相互作用的，如果失掉其中一种工具，人们就不可能完成一个完整的科学认识活动，就不可能得到科学的发现。以化工生产的设计思想和方法来看，要有什么样的反应器？要有什么样的流体输送器、传质器和热交换器，以及其中的温度、压力、浓度等条件如何？才能在单位时间内获得产量最高和质量最佳的产品。这些问题的解决，都必须把上述“软件”和“硬件”、思维手段和物质手段的研究，紧密结合起来才行。

此外，研究化学方法论还对哲学有推动作用。

现代化学方法也象物理方法、生物方法一样，正在把哲学推向前进。科学方法作为一门学问诞生之后，就成为哲学和科学之间的桥梁与纽带，加深了具体科学与哲学之间的联系和作用。因为，人们通过对科学方法论的研究，也就会对哲学的规律、范畴、认识论、辩证逻辑等方面的研究起着推动的作用。例如，从十九世纪中叶后，物质的化学结构的研究在发展，结构的概念和方法等，在今天已上升、推广成了自然辩证法、哲学的范畴。化学方法论中研究这样的课题，具有重要的理论价值和实践意义。

上述几个方面的研究内容不是孤立分散的，而是相互结合和彼此渗透的。

研究化学方法论的指导原则

学习和掌握化学方法论对于化学工作者和自然辩证法工作者都十分重要，那么，我们应该怎样研究？在从事研究时应该遵循哪些基本原则呢？

第一，必须坚持理论联系实际的原则。

化学方法论在人们对化学的认识中，还仅仅是一种主观手段或思维工具，还不能代替具体的化学研究的实践活动本身。只有在实际的研究过程中，把化学方法论与研究、教学的具体实际相结合，作到有的放矢，才能收到功效。化学研究内容众多，纷繁复杂，各有各的特点和要求，如合成化学的研究与量子化学的研究就存在较大的差别。合成化学中实验方法尤为突出，而量子化学中数学方法极为关键。所以，从研究对象的特点和实际出发，化学方法才能发挥事半功倍的效果。

对于一个具体的研究过程而言，研究的实践活动是不断变化的，在不同的条件下，会出现新情况、新问题和新特点。例如，一些化学反应在封闭系统与开放系统表现各异；在高温、高压与低温、低压有所不同；在有催化剂与无催化剂参予下差别很大等。因此，当研究对象的情况和条件有所变化时，所使用的科学方法也就相应有所变化和发展，切忌在研究中生搬硬套单一模式。这也就是说，化学方法的运用不仅是具体的，而且是灵活的和多变的，一定要坚持具体问题具体分析这个马克思主义的根本原则。

还必须指出，我们所说的化学方法论是化学研究方法一般规律性的理论，它本身不能代替化学研究的具体方法，因此，要把它付诸相对稳定的或不断变化着的化学实践过程的时候，就必须使这个一般的研究方法具体化为符合实际情况的科学方法，具体化为符合实际的操作步骤。因为，一般化学方法本身并不能回答某项具体研究中的具体作法

和步骤。例如，合成一个化学新分子的实验方法，与测定化学热力学的生成热、燃烧热等实验方法就有所不同，一般的实验方法必须还要再次具体化。

第二，必须综合运用各种化学方法。

化学方法论本身是一个严密的整体，其中各种方法都是化学认识中不可缺少的工具、手段和步骤，它们各自有秩序地、有区别地而又相互联系地处于化学认识过程的一定阶段和地位。因此，对于一个完整的认识过程来说，就必须综合地、系统地、具体地运用各种方法，不能偏爱或偏废某一种方法。否则，研究工作就难免不遭挫折以至失败。从当代化学发展趋势来看，其综合性越来越强。因此，在现代化学的研究和教学中，综合运用各种方法尤为重要。

综合运用化学方法是指在具体掌握各种方法的合理性及其适用范围的前提下，对于一个具体研究过程而言，并不就意味着所有方法齐头并进，而是要抓住带有突破性的关键方法，同时合理地辅以其它各种方法。只有这样，才能使研究过程真正地少走弯路，得到事半功倍的效果。例如，门捷列夫由于准确地抓住了元素原子量之间存在某种关系，由此问题出发，在正确地运用了分类和比较之后，就紧紧抓住了综合与分析的方法，最后归纳、概括为元素周期律的假说理论体系。在此基础上，进行演绎推理，预言了镓、钪、锗三个新元素；后来在实验验证的基础上，元素周期律便转化为科学的理论。正是因为科学方法正确地、综合地运用，才使门捷列夫完成了“科学上的勋业”。

第三，加强自然辩证法工作者和化学工作者的联盟和合作。这对顺利地开展化学方法论的研究是必需的。

研究化学方法论的目的有两个不可分割的方面，一方面，通过化学方法论的研究起到对化学工作者的指导作用，有助于他们自觉地掌握科学的思维方法和工作方法；另一方面，通过对化学、化工中科学方法的概括和总结，来丰富和推动马克思主义哲学。为了实现这两个目的，单纯靠自然辩证法工作者或者单纯靠化学、化工工作者，都是不可能达到的。自然辩证法工作者与化学工作者各有所长，但也各有所短。自然辩证法工作者一般来说比较熟悉科学方法论的一般原理，但对化学、化工的实际并不了解或不甚了解，对当前化学、化工发展中的关键和难题也不熟悉。因此，他们应当深化化学、化工方面的专业知识，密切注意化学、化工的最新成就和发展动向。化学、化工工作者在本门业务范围内是个专家，也懂得本门业务内许多具体的科学方法，但他们中有相当多数对一般自然科学方法论缺乏系统的了解。为了适应现代化学、化工的发展，他们需要系统学习并研究一般化学方法论。因此，这两部分人彼此学习，携手并进，相互取长补短，加强合作联盟，已成为历史的必然。也只有这样，才能开创化学方法论研究的新局面。

高兴华　傅寿宗

2. 化学研究方法的历史演变

化学这门古老而又富有生命力的科学，在其长期的发展中不断揭示自然界化学现象的奥秘，为人类造福，也为人类带来新的问题——如环境污染，等待着人类去解决。化学得以发展有多种因素，其中方法的演变对化学的发展起着重要推动作用。因此，讨论

化学研究方法的历史演变，可使人们系统掌握化学中方法纵横发展的全貌，便于引起化学工作者的重视，以利化学的发展。

化学从实践开始，化学中的各种方法源于实践。实践对化学来说是一种最基本的、最普遍的、最通用的手段。实践贯穿了化学发展的全部过程。最早的化学工艺实践活动是低级的、缺乏理论指导的、不自觉的实践活动，是人类从蒙昧时期到化学萌芽时期最基本的方式。人类的祖先在生活中接触到广泛的化学现象——火，并利用它来初步地，不自觉地改造着自然。我国古代从制造简单的器具发展到制造原始瓷器。世界上其他文明古国也均有类似的成就。

在发展陶器的新石器时代晚期，开始使用金属，并且在红铜和青铜的冶炼加工方面均具较高的水平。同时在实践中也逐步认识和利用了金、银、锡、铅等金属。由于生活上日益发展的需要，我国商周时代酿造业有了发展。随着丝麻等纺织业的产生和发展，染色技艺也发展起来。长沙马王堆一号西汉墓出土文物上有36种颜色，反映了当时染色技艺的高水平。世界各地在古代染色方面均有相当水平。我国从西汉的麻纸到公元二世纪蔡伦督制良纸，对文化的传播和交流起了巨大推动作用。几个世纪后我国人民又发明了火药，在世界上影响巨大。恩格斯曾指出："火药和火器的采用，决不是一种暴力行为，而是一种工业的，也就是经济的进步。"① 这些成就都与实践有直接关系。

直到十七世纪化学成为科学之前，化学的发展仍以化学工艺实践为主要手段。随着化学实践的基本方式由化学工艺活动向化学实验方法的过渡，古代化学才发展到了近代化学的确立时期。

我国的炼丹术和西方的炼金术，在实践中提供了化学实验方法的原始形式。炼丹家和炼金家们作了大量实验，尽管彼时的实验目的是追求长生不老药或追求点金之术，变贱金属为贵金属，千方百计寻求万能的哲人石。但是这个时期的实验也积累了不少化学知识，创造了许多实验用的仪器、装置和方法。

基于化学工艺的实践和原始的化学实验方法的运用，面对千变万化的自然界，当时的学者试图对世界的构成问题从理论上给以解释。从亚里士多德的四元素说到炼金术士们的点石成金的理论即"原性说"，都是笼统的、粗糙的、带有臆测性质的。这种孕育中的理论可以起到促使人们进一步观察、思考和探索的作用，为以后理论方法的产生做了准备。

化学研究的实验方法

十七世纪化学进入科学阶段，化学实验方法成为研究化学的重要手段。当然化学实验方法也属于实践的一种重要形式，但有其特点，在给定条件下以人工方式重复自然界的化学现象，以达到某一目的，或在给定条件下以人工方式提供某些自然界不存在的化合物。通过化学实验研究化学现象及其本质。

化学是一门以实验为基础的实验科学。化学从十七世纪发展到现在，从获取化学物质的观点来看，化学实验方法的发展可分为四个阶段，也是四次飞跃，标志着化学实验方法推动着化学逐步深入。第一个阶段，十七、八世纪，主要是通过化学实验方法了解

---

① 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1970年，164页。

天然化学物质，对一些元素和比较简单的化合物进行分析，分离、提纯与制取等。第二个阶段，从十九世纪二十年代维勒合成尿素，开辟了由无机物合成天然有机化合物的道路，把无机界与有机界联系起来。化学实验方法把人类对化学物质的认识推进到一个新的阶段，合成天然有机化合物阶段，显示出人类认识自然能力的提高。这不仅是化学的进步，同时也具有哲学意义。第三个阶段，二十世纪前半个多世纪，人工合成了非天然的无机的和有机的多种化合物。如橡胶、塑料、合成纤维等高分子化合物及金属陶瓷等新型化学物质，其性能在许多方面超过天然化合物，标志着化学实验方法达到了新的高度。第四个阶段，二十世纪六十年代以后，化学在分子水平上模拟生物在常规条件下进行复杂化学变化的实验方法，具有速度快、稳定、准确等优点。这就要求化学实验的水平更上一层楼。近年来在模拟生物体内的化学反应过程；模拟生物体内的物质输送过程；模拟生物体内能量转换和信息传递过程等方面正在努力探索。

事实证明，化学实验方法在化学成为科学以来，是一直起推动作用的直接的重要方法，其它方法不论在化学上多么重要，也不能将实验方法取而代之。

历史上化学实验方法的作用表现在六个方面：（1）澄清问题。波义耳最早把严密的实验方法引入化学。通过实验证明亚里士多德的“四元素”不是元素，并重复范·海尔孟证明水可转变为土的实验。取一种南瓜代替柳树①，证明水不能变成土，而是空气中漂浮的尘埃变为土。表明化学在成为科学时，实验方法就有一种澄清问题的作用或功能。（2）发现新物质（元素及化合物）。元素周期律能够在十九世纪六十年代被发现，其前提是足够数量的元素被发现。从十八世纪以来的一个半世纪里，比较集中地通过实验发现的元素达60余种；包括气体元素、金属元素和卤族元素及其它非金属元素。在周期律出现后，新元素、新化合物的发现，依然是发挥实验方法的作用。（3）研制新物质合成新材料，均以化学实验方法为实现的手段。（4）验证理论，为理论提供依据。镓、钪、锗等元素先后被实验发现，令人信服地显示出周期律的预见性，引起人们对周期律的普遍重视和承认。（5）对建立学科起奠基作用。化学在十七世纪由于波义耳的工作开始被确立为科学。基本原因之一是波义耳做了大量的实验工作，使他进行理论概括时成为可能。（6）在科学的发展上起推动作用。近代化学迅速发展，形成了不少分支学科，无不与实验方法相联系。现代化学发展成化学之树，实验方法仍然是必不可少的重要因素。这方面有大量事实，略举几例以资说明。

德国化学家维勒于1828年合成尿素，开辟了有机合成的道路。1845年德国化学家柯尔贝直接从单质合成醋酸后，人们又合成了葡萄酸、柠檬酸、琥珀酸、苹果酸等一系列的有机酸。1854年法国化学家贝特罗合成了油脂类物质，1861年俄国化学家布特列洛夫合成了糖类物质。这一时期还有许多有机化合物被合成，发展了有机化学，奠定了有机合成这一分支学科的基础。又如高分子化学的建立过程中，从1924年提出天然橡胶分子是高分子量的大分子概念，到1930年提出高分子稀溶液的粘度与其分子量之间的定量关系，进入定量测定高分子分子量的阶段。为建立高分子化学作了准备。1940年用超离心机法可以直接测定几万至几百万的分子量，并且可以测出分子量的分布。五十年代以来改变了原料，从而提高了高分子材料的质量，如耐热、耐化学腐蚀及容易加工等性

① 柏廷颖：《化学简史》，商务印书馆，1979年，79页。

能。六十年代以来，高分辨核磁共振成为研究高分子结构的有效工具。电子显微镜在结晶性高分子形态学的研究上取得重要成果，推动着高分子化学的不断发展。再如结构化学的建立和发展同样也离不开实验方法。首先，正是在运用各种物理实验方法，对电子、原子等微观粒子运动规律认识深入的基础上建立起了价键理论。其次，正由于价键理论不能圆满解释由实验提供的许多有机共轭分子性质与结构的事实，这才促使分子轨道理论受到人们的重视。此后在长期积累有机化学反应的实验基础上，通过一系列有机合成实验，才有可能于1965年总结出分子轨道对称守恒原理。

在化学实验中结合使用物理实验方法，已成为化学实验发展的一个显著特点。实际上这种情况很早以前就存在了。在人类接触到化学现象的同时，也接触到了大自然的物理现象。在早期的化学实践中，为了达到化学工艺上的某一种目的，也自觉或不自觉地创造和运用了一些物理方法。例如钻木取火中的摩擦，制铁中的鼓风装置，炼钢中的锻打，造纸中的部分工序都是物理方法。当化学发展到近代，大量运用化学实验方法的时候，物理实验方法也得到应有的重视。波义耳曾做过许多物理实验，如著名的波义耳定律的实验，对化学中气体性质及气体反应的研究有重要意义。十八世纪，拉瓦锡在物质不灭定律或质量守恒定律指导下借助于天平，充分肯定了定量方法。十九世纪戴维通过研究电学，把电学实验方法结合到化学中来，1806年在英国皇家学会发表《论电的化学作用》，获得当年最重要的电子研究奖金。法拉第关于电解的研究继承并发展了这方面的工作，提出电解定律等，对化学的发展做出重要贡献。十九世纪末二十世纪以来这方面新的进展神速，对化学的发展促进作用甚大。比较突出的有光谱法、X射线衍射法、电子衍射法、核磁共振法等，各种仪器用来测定分子结构因而成果累累。另方面，对各种化学物质的分析与鉴别方面，二十世纪前主要是化学分析。随着科学技术的发展，对各种样品中组分的测定要求越来越高，一系列物理仪器分析的方法相继出现以满足新的需要。许多提供特殊条件的物理设备也供应用。这些物理实验方法，从各个不同的方面影响或推动着化学的发展。从深入揭示分子结构与性能的奥秘方面取得进展，在鉴别物质的能力方面空前提高，无论是准确性还是灵敏度方面，都达到了前所未有的水平；为高温高压等特殊条件下进行的化学反应提供了可能。可见物理实验方法在推进化学的发展中，起着提供向微观领域深入的条件，向获得高纯物质和人工合成新材料方面提供条件，并为化学的理论发展提供精密的实验依据。

总之，在化学中由于物理实验方法更多地引入，促使化学进入现代水平。这是由于化学现象总是与物理现象相伴随着的，化学实验方法中必定辅之以物理实验方法，正是化学运动与物理运动本质联系的表现。

化学研究的理论方法

理论在化学中十分重要，由于科学理论的出现，化学成为系统的科学。随着化学的发展，理论方法也不断丰富，学科的理论性也不断加强。

化学在发展过程中要求对各种现象进一步从本质上解释清楚，必然求助于理论方法。它标志着人类对化学现象的认识由现象深入到本质，由感性上升到理性。化学中理论方法的发展可分为三个阶段，每个阶段的特点不同、作用不同，表现的形式也不完全一样。

第一个阶段，十六至十八世纪，提出的理论比前一个时期具体，针对着具体的化学现象提出了理论，不过这仅仅是初步的理论。在十六世纪化学工艺和实验方面发展的基础上写出了《炼金术》、《金属学》、《论矿石和试金》及《矿石的性质》等著作。记录了许多新的材料和事实。医药化学时期帕拉苏斯提出的三要素说，比起亚里士多德四元素说前进了，具体了。具体到某些化学物质的组成上来，但是还不确切。帕拉塞尔士的信仰者范·海尔孟提出的元素理论并不强调三要素，而是认为水是化学物质的基础要素，并通过柳树实验给以证明。这一点也比亚里士多德四元素理论具体。范·海尔孟还认为生物体内的反应受"酵素"支配，他的学生进而提出酸和碱相互作用产生生物体内的各种反应的理论，并以盐与酸相反应的实验给以论证。而另外一些制造药品的化学家，则关心物质的性质及其变化，提出了五元素说，即在三要素基础上增加了粘液和土。以上这些理论虽然有了一定的事实依据，但是并不充分，也不够确切或者是错误的，因而这种早期理论易被新的理论所代替。在波义耳提出科学的元素概念后，化学才有了科学起点。这是波义耳在十七世纪大量实验基础上的概括，然而还不清楚元素究竟是那些具体物质。正是由于这种原因，为了统一说明燃烧、金属锻烧、火焰等现象，施塔尔提出燃素说。虽然在一段时间内能够满足理论需要，但是毕竟由于立论的根据有限，理论本身有错误，在一系列新元素特别是气体元素发现之后，燃素说终于被燃烧的氧化理论所代替。

第二个阶段，十九世纪化学大发展时期。化学在生产力迅速发展的有力推动下得到飞速前进。这个时期的理论发展是多方面的，涉及许多基本的内容：关于化合物组成的关系；当量关系；关于化合物组分的基本单位的理论；原子价的理论；原子—分子的理论；关于原子量与元素性质关系的理论；关于有机化合物结构的理论；关于溶液性质的理论；关于化合物反应（气体的和溶液的）的理论；关于溶液中带电质点的理论；关于化学反应速度、反应机理的理论等等。这些理论涉及到化合物分子和化学反应的许多方面，影响着十九世纪化学的发展，显示出理论方法的巨大作用。恩格斯对化学中重大理论所起的作用，均给予很高的评价，他指出："在化学中，特别是由于道尔顿发现了原子量，现已达到的各种结果都具有了秩序和相对的可靠性，已经能够有系统地，差不多是有计划地向还没有被征服的领域进攻，就像计划周密地围攻一个堡垒一样。"恩格斯还称赞门捷列夫周期律的发现是"完成了科学上的一个勋业"①。事实正是如此，十九世纪化学理论的发展有力地推动着化学前进。

第三个阶段，二十世纪以来化学有三个特点或趋势：其一是向微观方面深入，主要是由于现代物理打开微观领域的大门，出现了许多研究微观领域的物理学，如原子物理、原子核物理、量子力学等等。这些微观物理理论渗透到化学中来，从理论上把物理学与化学融合在一起，深入到化学的许多方面，产生了许多崭新的理论，大大增强了化学中理论方法的功能，更加显示出理论方法的指导作用和预见作用，推动着化学更全面地向纵深发展。其二是使微观与宏观结合起来，都有相当的进展。特别是在探索生命的化学奥秘方面，当代化学正在日益发挥着愈来愈大的作用。其三是在宏观方面开辟新领域。其中耗散结构理论在七十年代后期诞生，展现了全新的天地。

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，95、51页。

化学理论表现的形式是多样的，有概念、定律、公式、方程、假说和学说等。各种理论形式有其发展过程。概念是化学理论中最基本的要素。定律反映一定条件下的规律，一般都比较确切。一般的说，公式或方程反映在一定条件下若干因素之间量的关系。有些是经验关系式，有些是半经验关系式，有些则是反映一定规律的关系式。假说是理论方法上长期普遍采用的重要形式。假说的提出总是有一定的事实根据，但事实还不充分。假说提出来常常起活跃学术思想，促进理论发展的作用。假说总是向两个方向发展，一个方向是与新的有关事实矛盾，而终被抛弃。一个方向是逐步修正、补充完善，为有关事实所证明，终被肯定，发展成学说或理论。但是不论假说的哪种发展前途，一旦提出后对理论的发展都有积极意义。无论是正确的或错误的假说，都为正确的理论准备一定的条件。化学史上这样的例子很多，十九世纪有机结构理论的演变，生动地说明了这个问题。

各种不同形式的化学理论并不是同时出现的，而是有其发展过程。在十七世纪以前，大多是简单的，与当时发展水平相适应的，比较表面的理论见解。在十七、八世纪，出现了反映一定科学水平的概念，个别的定律及学说，包括有错误内容的学说。在十九世纪的化学理论中，出现了较多的概念、定律、假说、学说、公式、方程式。表明化学的发展达到了较高的水平。当然，这些理论形式也表现在其它自然科学中，并非化学理论所独有。问题是对于不同的学科概念、定律、公式、方程式、假说和学说有着不同的内容。

十九世纪末以来，化学理论向更本质的问题深入和数学化方面发展。

推动化学理论发展的因素至少有四：（1）理论总是与科学和生产发展的水平相适应。所以理论的发展归根到底决定于生产，这是最基本的因素。（2）新的发现（通过实验或其它途径）与原有的理论发生矛盾，促使理论发展。（3）其它相邻学科新进展的影响。（4）理论上的论争和比较是又一重要因素。这四个因素互相补充，互相促进。前三者易为人们所了解，下边着重说明最后一个因素所起的积极作用。

化学理论的发展是一个历史的长链。由于认识的发展，理论上会出现不同的见解，展开争论和比较。这些不同的见解无论是肯定的或是否定的或是修改补充的，都是在理论争论和比较的历史中前进。帕拉塞尔士在十六世纪提出汞、硫、盐组成金属的三素说。范·海尔孟提出元素的气体理论[①]。还有人提出五元素说。波义耳在1661年发表的《怀疑派化学家》中否定和清除了许多旧观念。例如亚里士多德的四元素说，帕拉苏斯的三要素说，以及火可以分解物体为基本元素的理论等。其意在建立一个“微粒哲学”理论。为此他对所有化学反应和物理性质作出机械论的解释，这对以后化学的发展影响很大[②]。

关于燃烧的性质问题，在十八世纪为施塔尔的燃素说所统治，并有广泛影响。但是在一连串的气体被发现后，特别是由于发现氧气，从而产生了燃烧的氧化理论，推翻了权威的燃素说而得到公认，成为十八世纪后期化学理论的重大成就。

十八世纪后期，法国化学家普劳斯特与法国学者柏托雷关于化合物有定组成与无定

---

① 柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，57—60页。

② 莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，124—127页。

组成之争持续近十年之久，有利于对化合物这一概念的理解。同时也促使人们研究在复杂情况下化合物组成可变的观点，是否也有合理之处。这一点，后来在1914年为库尔纳可夫所肯定，并建议这类组成可变的化合物名为“柏托雷式化合物”。

十九世纪又有盖·吕萨克与道尔顿关于气体化合定律之争。在僵持不下的时候，关注这场争论的阿佛加德罗从旁发现新问题，提出分子假说，使道尔顿的原子说与盖·吕萨克的气体化合定律统一起来，从而促使原子理论向前发展。十九世纪三十年代贝齐里乌斯与杜马关于有机化合物的二元论与一元论之争，最后以贝齐里乌斯的失败告终。把电化二元论限制在无机化合物的一定范围，澄清了问题。

二十世纪前期在化学键理论的发展过程中，柯塞尔的电价键理论与路易斯的共价键理论互为补充；价键理论与分子轨道理论此起彼落，也可说是理论论争的一种表现。

总之，化学上理论的论争与比较有利于鉴别真伪，有利于鉴别正确与错误，有利于化学的发展。

以下，概述一下数学方法在化学理论发展中的作用。在一门科学中运用数学的多少，标志着学科成熟的程度。马克思认为一种科学只有在成功地运用数学时，才算达到真正完善的地步。恩格斯指出，数学是辩证的辅助工具和表现形式。在化学中数学的运用体现了这些论断的正确。

在化学中数学方法的运用有一个较长的发展过程。在近代无机化学、有机化学及分析化学领域是以初等数学为主要数学方法，多用于处理实验数据。当化学发展到研究化学变化的规律和各种热性质的关系时，微积分成为经典化学热力学、化学动力学和化学统计力学的主要数学方法。本世纪以来，化学的研究深入到微观领域，从而使许多数学分支进入了化学，得到广泛应用。特别是在近几十年里，数学和化学的关系迅速发生着变化，“数学像语言一样是一种交流信息的工具，在科学的讲堂里它应当是这样，至少对于各种应用类型的数学来说是这样”[1]。如今，几何学的拓扑学和图论，代数学的线性代数、矩阵论和群论，数学分析的线性和非线性微分方程理论及泛函分析等，以及统计学、概率论、运筹学等，在化学中也得到应用。随着计算机的广泛应用，计算机成为处理化学问题的有力工具。随着化学实验手段的改进和理论水平的提高，化学与数学的关系更加密切，以致离开现代数学、化学就失去现代的意义。这种状况，反映了化学这门经验性比较强的科学，正在走向比较成熟、完善和精确化，因而理论性也日益增强。

实验方法和理论方法的关系

化学史表明，化学中的实验方法与理论方法是具体的历史的统一，两者之间相辅相成相互促进。

化学的最终目的是制造出各种各样适合社会需要的化学物质（包括天然的和人工的），不论在应用方面，还是理论方面都是如此，理论也是直接或间接服务于实际应用的，并不是为理论而理论的。化学的发展以实验为基础。即使量子化学中的分子轨道理论这种被认为是理论性很强的方法，如果离开实验也就不成其为理论了。即使理论性强的“从头计算”，也是以相对论效应近似、BO近似、单电子近似为三大基础。因此，实

---

① J.B.登斯：《化学中的数学方法》原序，科学出版社，1982年。

验是重要的、基本的。分子设计的出现，在于提高寻找化学物质的准确性和目的性，减少盲目性。分子设计可以简化一部分实验内容，但不能代替全部实验，而是提高了实验水平。任何忽视或取消实验方法的观点都是错误的。

另一方面，实验方法和理论方法探索的目的之一，是为了认识化学现象的本质和规律。实验所获知的现象应上升到理论来认识，从这个意义上讲，实验是为探索理论服务的，任何忽视化学理论的重要性，片面强调实验的观点，必然使化学降低为无规律的、盲目摸索的单纯的实验，因而也就失去了学科的科学性。

事实上，实验方法与理论方法密切相关，实验检验、证实、丰富理论，同时从一定意义上说，化学实验本身就具有理论意义。在现代化学中，实验与理论相互促进的密切关系，体现得更明显了。这就是说，实验方法与理论方法是一致的，都是从低级向高级发展着，从简单向复杂发展着。从总的发展过程来看，实验和理论两方面并不一定同步，而是一个时期以实验方法为主，另个时期则理论方法发展显著，也有的时候两方面均获得明显地发展。应当看到化学的经验性还比较强，与其它理论科学相比理论性尚弱，预见性不足，需要进一步提高。

化学与其它学科相互配合的方法

化学与其它多种学科相互配合的方法，是化学发展到二十世纪，所涉及的问题由宏观扩展到微观，把宏观与微观结合起来深入研究的情况下，往往需要采取与多种学科共同围绕一个重大课题，从不同的侧面相互配合的方法进行攻关。这种方法反映了现代科学（包括化学）高度分化与综合的辩证统一。例如我国研究人工合成胰岛素问题时，就运用了有机合成、生物化学、分析化学、生物学及材料化学等多学科的配合方法。继而在测定胰岛素晶体结构方面，同样又采取了包括数学、物理学、生物物理、结构化学、结晶学及生物化学等多种学科相互配合的方法，使晶体结构的测定结果达到国际先进水平。

这种化学与多学科相互配合的方法，是一种横向的配合方法。与这种方法相互补充的方法，是纵向配合的方法。所谓纵向配合是指学科在发展过程中的前后配合。但是这种配合方法又是通过化学家来进行的，从掌握化学的人来说则是一种合作方法。早期的形式是以间接合作方法或比较松散的合作方法出现的。往往是一个问题有许多人参加工作，不过缺乏严密的计划和组织，而是分散的或前后相继的研究，形成化学持续前进的历史。这种合作方法的形成，有其社会因素与当时科学、生产发展的水平相适应。当然，合作方法以上述形式出现的时候，偶尔也有直接合作的形式。常常表现为导师与学生之间的合作。这是一种直接的小合作方法，也是由工作本身的需要所形成。这种合作形式在化学史上持续的时间相当长久，直至二十世纪。

现代合作方法表现的形式，与以往合作方法表现的形式有很大差别。这种新的合作形式不是可有可无的，而是必须的、多数人的、多学科的直接合作方式。这主要是学科本身发展的要求。现代化学要求解决更难的问题。从难度、精度、深度等方面，从实验水平和理论水平方面都提出了更高的要求。需要较多的人从多方面围绕一个目标进行合作，这就要求以直接的大型的合作方法为主，配合间接的合作方法进行工作。

耗散结构理论的诞生，是当代化学中合作方法的又一范例。普利高津在《我的科学

生活》① 一文中叙述了耗散结构理论产生的合作经过。他同V.马托、A.科尔曼、N.特拉普耐尔等人合作，共同宣布一系列新成果，并且与实验相符合。他还与J.M.维阿姆合作，应用到胚胎学的演变中去。J.梅克思内、S.R.德哥鲁特、P.马祖尔、A.卡加勒斯基等人的工作证明，不可逆现象的线性热力学特性有很多用途。这些激励着普利高津把它的应用扩展到一些更加普遍的环节中去。在合作者之间，受到启迪，这样经过20年的间接的和直接的合作努力，“我们的合作很快就产生了一个有关演变的一般准则，它适用于非线性范围，因此超出了最小熵产生原理的有效范围。由此得到的稳定准则，接着又导致了临界状态的出现，并伴随改变性态和可能出现的新结构。这样无序变有序的过程相当意外的出现……，与典型的平衡结构不同，在远离平衡的非平衡区出现了耗散结构。”“这一成果的取得来自各方面的支援和可喜的合作。”②

应当看到，合作的方法不仅仅是现代化学中所需要的方法，也是现代科学发展和社会发展的历史条件下产生的一种需要。因而在其它学科方面也是需要的。

总之，从化学史的角度来考察，化学研究中的各种不同方法，是随着化学的发展而发展的。各种方法的发展是从低级到高级、从简单方法到复杂方法，从单一方法到多种方法的综合运用，从实验方法为主到实验方法与理论方法并重，从单独一学科到多种学科相互配合的方法。这样，就形成了各种方法纵横发展的全貌。

张　家　治

（二）化学化工研究的一般方法

1. 化学研究的选题

科学研究的第一个环节，就是选题。课题的选择和确定，在很大程度上关系到研究工作的方向、水平甚至成败，是科学研究中具有战略意义的大事。可以说，课题的形成和选择，“是研究工作中最复杂的一个阶段。一般说来，提出课题比解决课题更困难。”③

化学研究的选题问题，与科学研究选题的一般方法论原则有关，但又有自身的一些特点。

化学研究课题的某些特征

化学研究课题具有一般科研课题的特征。

“科学研究工作最大的特点在于探索未知，科学研究成果的意义也正在于此。”④ 科学研究，就是提出问题并且进而解决问题的过程。科研课题首先必须是科学上需要解决而尚未解决的问题。

---

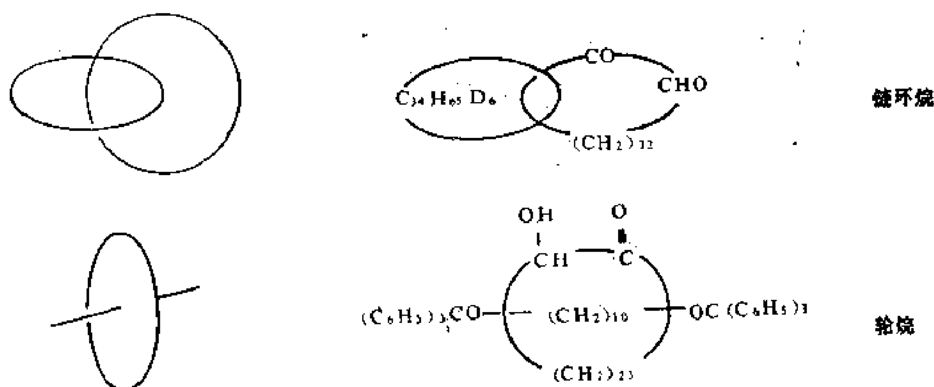
① 湛垦华、沈小峰等：《普利高津与耗散结构理论》，陕西科技出版社，1982年，1页。
② 同上，5—7页。
③ J.D.贝尔纳：“科学研究的战略”，中国社会科学院情报研究所编译《科学学译文集》，科学出版社，1980年，28—29页。
④ 严济慈：《谈谈读书、教书和做科学研究》，《红旗》1984年第1期，21页。

但是，并不是任何这类问题都可以作为科研课题的。科研课题还必须是用科学术语表述出来的、明确具体的问题。就是说，实验课题中必须包含有可控条件，理论课题中必须有严格的范围。这样的问题在解决之后，结果才可能明确具体，他人才能进行验证，才具有科学意义。用空泛的语言表述出来的、条件和范围都很含混的问题，不能算作科研课题。

科学发展到今天，人类对自然界的认识已经获得了许多有意义的成果。但是，自然界是无限的，人类仍然面临着广大的未知领域。而我们对未知领域的认识又只能是逐步逼近的。这就决定了一代人不可能把前人提出的用科学术语表述出来的、明确具体的问题都解决。所以，我国著名学者严济慈先生指出，科研课题还必须是经过努力短期内能够解决的，而不是那种经过十年、二十年的努力都没有希望解决的问题[1]。

除了这三个一般特征外，由于化学研究对象以及化学学科的历史和现状的特殊性，化学研究课题还有一些自身的特点。

在机械运动、物理运动、化学运动和生命运动这四种自然界的基本运动形式之中，化学运动的复杂性处于中间的程度。物理学相对成熟一些，原因之一就是它所研究的运动形式简单一些，绝大部分现象都可以借助仪器直接或间接观测到。生物学研究的物质运动形式最复杂，决定许多宏观的生命现象的微观机制现在还无法观测，有不少复杂的研究对象还没有真正涉及到。"化学是变革分子的一类过程。"[2]人们已经能够预言并合成前所未知的结构奇特的化合物，如链环烷（catenanes）和轮烷（rotaxanes）[3][4]等。液相中分子碰撞到激烈振动发生断键和成键的时间在10^{-13}秒数量级，跟踪这种变化需



要有分辨力为10^{-14}—10^{-15}秒的观测手段，现在利用红外激光分辨力可达10^{-12}秒，已经到了可望而又可及的程度。化学研究已经开始深入到观测微观过程，设计和合成有特定功能的复杂化合物，并开始向严密推理阶段过渡。一方面，化学要研究比物理运动更复杂的运动形式；另一方面，它又比生物学更接近自己的复杂对象一些。这就是化学研究课题所特有的复杂性。

---

① 见前页注④
② 唐有祺：《化学动力学和化学反应器原理》、科学出版社，1974年，1页。
③ E.Wasserman, *J.Amer.Chem.Soc.*, Vol.82, p.4433 (1960).
④ L.T.Harrison and S.Harrison, *J.Amer.Chem.Soc.*, Vol.89, p.5723 (1967).

实验研究方面课题的复杂性突出反映在有机合成上。1981年完成的人工合成红霉素的课题中，仅红霉素分子中大环内酯环系的合成就异常复杂，它含有10个不对称碳原子，因而可能的立体异构数目可达1024个之多①。要在这么多可能出现的结构中，控制立体定向反应，唯一地得到需要的产物，是极为困难的。

理论研究方面课题的复杂性，明显地表现在对理论的定量化和严密性要求上。科学家在量子化学中采用的LCAO方法，计算的积分数与电子数的四次方成比例。一个由20个原子组成的分子就可能包含100个电子，所需计算的积分数就是一亿个，只有借助于大型电子计算机才能完成。

现代化学中已经形成了一些比较有效、准确的理论，可以用来指导实验研究。但是有许多理论还远不够完善，特别是还没有达到完全定量化的阶段。现代化学的这种特定状况，要求人们在进行实验研究时，既要运用已有的理论，同时又要在实验过程中对已有理论进行修正、充实和发展，甚至提出新的理论。所以，现代化学研究中有不少难度较大的课题，既要求有理论研究，又要有实验探索，在同一个课题中理论和实验相互交错，相互融合。

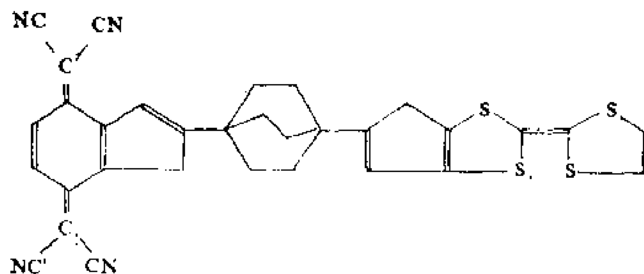
维生素B_{12}（$C_{63}H_{90}N_{14}O_{14}PCo$）的合成，由19个国家的一百多位化学家经过11年的共同努力才完成②。这个课题中就含有理论研究和实验探索两方面的内容。伍德沃德正是在研究这个课题的过程中，产生了分子轨道对称守恒原理的基本思想，与霍夫曼一起提出了分子轨道对称守恒原理③，继而又用这个理论推动了进一步的合成工作。

现代自然科学的发展有两个重要特征：一是学科渗透的趋势不断加剧，在传统学科的交叉点上出现了许多新兴学科；二是科学与生产的联系日益密切，科学转化为直接生产力的周期愈来愈短。由于研究对象的特殊性，化学与其它学科及人类生活的各个方面发生了最广泛的联系，使它在学科渗透和满足社会经济需要上具有特别重要的地位。正如霍尔曼所说，化学处处都有，化学独特的原理多方面地解释了世界。也正如洼菲所说，“化学是生活”，“是一个许多科目相遇的‘连接点’”④。化学在现代科学和社会背景中的这种地位，使它的研究课题的边缘性比重愈来愈大，应用意义十分明显。化学与其它基础学科和技术学科的交叉点上，出现了不少有意义的重大课题，这些课题吸引了许多人的注意力。

化学与物理学、生物学、地学、天文学等基础学科相互渗透涌现出来的大量课题，已经引起了人们的高度重视，并在研究这些课题的过程中取得了许多成就。在新材料和新能源的开发，生物技术和微电子技术，以及医药、食品等工业中，许多关键性的化学研究课题已经提出，而且随着新的技术革命的深入发展，这类课题还会更多。例如，人们预计，下一步电子技术的微型化，可能要发展到用单个分子来作为功能电子组件。有人设计了超小型规模的把交流电源转换成直流的分子整流器⑤；如何合成类似的化合物，则是微电子技术向化学提出的课题。化学模式识别用于医学、石油勘探和食品工业

---

① 叶秀林：“从立体选择反应看红霉素全合成的艺术”，《化学通报》1983年第8期，1页。
② 刘宗明：《分子轨道对称守恒原理及其在有机化学中的应用》，高等教育出版社，1982年，4页。
③ 邢其毅：“分子轨道对称守恒规则是如何发现的”，《化学通报》1980年第9期，13—15页。
④ 转引自：《化学教学》1984年第6期，34—35页。
⑤ R.E.纽纳姆：《结构与性能的关系》，科学出版社，1983年，48—49页。



等也出现了不少研究课题[1]。我们甚至可以说，几乎没有什么学科，没有什么部门不与化学发生联系，不能够向化学提出研究课题的。

化学研究课题的特征还可以找出一些，以上三个方面是比较突出的特征。

寻找化学研究课题的途径

寻找科研课题的具体方式很多，如查阅文献、请教名家、同行讨论、到有关部门进行调查、深入生产了解情况等。但是，从方法论上看，寻找化学研究课题有如下一些一般的途径。

（1）探究原因

人们在各种形式的实践中可以获取许多感性的化学经验材料。这些经验材料所反映的是化学物质和化学变化的现象。如果对这些现象之间的联系或背后的原因进行思考，常常可以找到很有意义的研究课题。

十八、十九世纪的化学实验，使绝大部分天然元素被陆续发现，同时这些元素的性质得到了较系统的研究。德贝莱纳、培顿科弗、格拉斯顿、库克、欧德林、尚古多、迈耶尔、门捷列夫等人，分别给自己提出了这些元素间是否存在某种联系的问题，并对此进行了认真研究，最后由门捷列夫和迈耶尔找到了元素间的联系，发现了周期律。

又如，为什么乙酰氯中的氯和乙基氯中的氯存在着很大差别。马可夫尼柯夫发现正统的结构理论没有注意这个问题，便把它作为重要的课题进行研究，在一系列工作的基础上，提出了马可夫尼柯夫规则[2]。

近现代的实验结果表明甲烷（CH_4）为正四面体结构，但基态的C原子只有两个未成对的P电子。何以理解C原子与H原子形成CH_4的原因呢？为了回答这个问题，鲍林[3]和斯勒特[4]提出了杂化轨道理论，促进了现代化学键理论初期的发展。

对实验结果进行分析整理，有时候可以获得一些系统的认识，找到这些实验结果遵从的经验规律。如果注意进一步寻找这些经验规律背后隐藏的更深刻的原因，也可以提出一些重要的研究课题。

十八世纪末、十九世纪初，道尔顿在对气体进行研究的过程中发现了分压定律。之后，他又寻求这个定律的解释，这就导致他的原子论思想的产生[5]。他不仅用原子论解

---

① 江世亮："陈念贻谈计算机化学"，《世界科学》1984年第5期，1—3页。

② Henry M.Leicester, *The Historical Background of Chemistry*, p. 186, John Wiley & Sons, Inc. (1956).

③ L.Pauling, *J.Amer.Chem.Soc.*, Vol.53, p.1367 (1931).

④ J.C.Ssater, *Phys.Rev.*, Vol.37, p.481 (1931).

⑤ J.R.柏廷顿，《化学简史》，商务印书馆，1979年，181—185页。

释了分压定律，还解释了定比定律，并且得出了倍比定律，成为“近代化学之父”（恩格斯：《自然辩证法》）。

（2）寻找不足

人们对于事物的认识，不是一次完成的。最初提出的理论往往有待发展，率先做出的实验大都尚需改进。如果对较早的工作进行分析，找到了其中的不足之处，也就找到了改进、推广或者发展这些工作的课题。

氢分子是最简单的电中性分子，研究它的结构具有重要意义。1927年海特勒和伦敦用变分法求解氢分子的薛定谔方程，得到了氢分子的结合能 De = 3.14eV，与实验值 4.72eV相差较大。从这个不足之中，人们找到了改进计算方法的课题。围绕这个课题，不少人都做了工作。1933年，詹姆斯（James）和库立奇（Coolidge）得到了与实验值几乎完全一致（De = 4.70eV）的结果，但所用变分函数中含有的参数多达13个。此后，减化计算又成为一个重要的课题。到五十年代，徐光宪等人采用分子轨道构型叠加法，用3个参数，得到了与实验值较接近的计算值（4.08 eV）[①]。

用Kishner-Wolff还原法将醛类或酮类还原为次甲基时，要用封管和难以制备且价格昂贵的无水合肼。用此法时，极少量的水还会引起副反应。科学家也是从不足之中，找到了改进这个方法的课题。黄鸣龙改进法[②]正是对这个课题进行研究的结果。

（3）揭露矛盾

由于化学研究对象的复杂性和人的认识的曲折性，化学发展过程中不可避免地会出现一些错误的学说和虚假的实验现象。揭露其中的矛盾，可以提出新的研究课题。

十八世纪，拉瓦锡把大量精确的实验材料，尤其是氧的发现和金属煅烧实验联系起来，系统分析了燃素说与这些实验材料之间的矛盾，给自己提出了重建燃烧学说的重大课题，建立了氧化说，完成了化学上的一场革命。

1799年普卢斯明确提出定比定律，贝托雷以溶液、合金、玻璃及一些金属氧化物和盐基性盐类的组成作为论据，认为这个定律不成立。普卢斯在论战中分析了贝托雷的见解中的矛盾，首次把化合物与混合物的概念区别开来，进一步论证了定比定律的正确性。

（4）检验成果

一个学说的真理性不仅反映在它的“解释力”上，还反映在它的“预见力”上；一个实验结果的可靠性，不仅取决于完成这项实验的方法和仪器，还在于它能否为他人所重复。对它们进行进一步的检验，即可成为重要的研究课题。

拉姆赛发现了氦和氩之后，认为周期表应补充新的一列，并据此预言了其它惰性元素的存在。为检验拉姆赛的补充是否正确，寻找新的惰性元素的课题就被提出来了。氪、氖、氙的陆续发现，就证实了拉姆赛的看法。

1925年，诺达克（W.Noddack）和塔科（I.Tacke）通过分析挪威产的铌铁矿石，宣称他们发现了第43号和第75号元素，并将它们分别命名为“Masurium”（Ma，锝）和“Rhenium”（Re，铼）。他们因此获得了李比希奖章。这个结果是否可靠？重复

① 徐光宪：《物质结构》（上册），人民教育出版社，1961年，255—258页。

② 黄鸣龙：*J.Amer.Chem.Soc.*, Vol.68, p.2487 (1946).

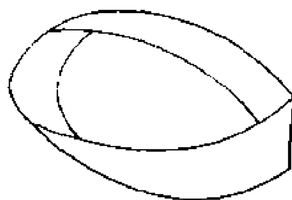
检验就成为新的研究课题。后来经一些科学家研究，肯定了他们对于铼的发现，而否定了所谓锝的存在①。显然，无论是对他们的结果肯定还是否定，对于化学的发展都是有意义的。

（5）逻辑要求

化学发展过程中，少不了逻辑目标的追求。逻辑要求不仅可以使化学趋向形式上的完美，而且还能引起一些实质性的进展。逻辑要求是寻找研究课题的重要途径。

六十年代以前，配位场理论的研究取得了许多重要成果，但是从逻辑严整性要求上看，这个理论方法还不够完善。六十年代，唐敖庆及其研究集体②在这方面开展了一系列工作，通过引进一类新的偶合系数，沟通了连续群与点群、高对称点群与低对称点群之间的联系，使这个理论的计算标准化，并建立了分子壳模型，统一了计算方案，使配位场理论方法逻辑上更为严整。

1858年，拓扑学家莫比乌斯(A. F. Möbius)构想出一个单侧曲面③。这个曲面系指将一条纸带的一端扭转180°后粘到另一端上所形成的一种几何形状，称为“莫比乌斯带”。它有两个重要的特性：如果一只蚂蚁在上面爬，不必翻越带子的边缘，里外都可以爬到；如果沿与带边平行的中线将带剪开，得到的不是相等的两个环，而是环径比原来大一倍的一个环。从逻辑可能性出发，能不能在化学上合成出具有这种拓扑结构的分子来呢？1982年6月，美国科罗拉多大学的化学家们，用与制做莫比乌斯带相似的两头接的办法，合成了具有这样的拓扑结构的分子。而且，如果将这样的分子中间的双键剖开，也可以得到环径大一倍而分子量不变的大环④。这是从逻辑可能性要求上提出研究课题并进而解决之典型例子。


莫比乌斯带

（6）学科渗透

化学与其相邻学科的相互渗透，使相邻学科与化学学科相互提出一些研究课题，也可以使它们相互受到启发，用彼之长克己之短，从而形成一系列新兴课题。

如果说我们前面提到的合成分子整流器的课题是化学应其它学科发展的需要而产生的话，那么，化学仿生学方面的大量课题则是化学家们主动向大自然学习，自觉接受生物的启示而提出来的。例如，人类能否通过弄清生物固氮的酶催化机理，并根据其中的某些原理，能动地设计并合成常温常压下也能固氮的催化剂这一课题，就是这样提出来的。卢嘉锡、蔡启瑞等分别提出的福州模型和厦门模型，正是以人们对固氮酶的生物化学研究为基础，模拟设计出温和条件下能够化学固氮的模型化合物。

（7）面向社会

促进化学发展的根本动力是社会需要。社会的需要是多方面的。如果面向社会，注

① M.E.韦克思，《化学元素的发现》，商务印书馆，1965年，458—459页；凌永乐：《化学元素的发现》，科学出版社，1981年，228页；赵匡华，《107种元素的发现》，北京出版社，1983年，226页。

② 唐敖庆等：《配位场理论方法》，科学出版社，1979年，3—5页。

③ M.克莱因：《古今数学思想》（第四册），上海科学技术出版社，1981年，269—270页。

④ 参见《发现》第1卷第1期，51—52页。

意倾听实践的呼声，可以从社会的实际需要中寻找到许多重大的课题，取得的成果也就具有直接的社会意义。

十九世纪后半叶，德国化学工业进入世界领先地位的一个重要原因，就是李比希学派深入化工生产，注意发现并解决生产中遇到的实际问题。我国化学家黄文魁在有机合成上取得了许多成果，他选择的课题大都是在社会需要中寻找的。1972年，当他在一次抗癌工作会议上听说三尖杉酯类生物碱具有抗癌作用后，马上把人工合成这类化合物作为重要的课题进行研究，并取得了杰出成果。

确定化学研究课题的原则

通过以上途径，一个研究者或者一个研究集体可以找到许多化学研究课题。在众多的课题当中，进行适当选择，才能确定出需要进行研究的课题。许多有重大成就的化学家在确定研究课题时，自觉不自觉地遵循了以下原则。

（1）专业兴趣与社会需要相统一的原则

有作为的化学家对自己的专业都抱有浓厚兴趣，很少有化学家在自己不感兴趣的领域中取得成果。因此没有人在自己完全陌生的方向上选择课题。但是，个人的专业兴趣只有与社会的需要密切联系起来，才可能使研究工作直接发挥出改造世界的职能，并得到社会的有力支持。可见，科研工作领域很广，课题很多，但占第一位的，应是研究经济建设中有重大经济效益的关键性的科学技术课题。五十年代初，杨石先等从我国的实际需要出发，选择了研制植物激素和农药方面的课题，不仅填补了我国在这方面的空白，同时也对我国农业生产的发展起到了积极的作用①。后来，以此为研究方向而成立的南开大学元素有机化学研究所，也受到了国家的重视。

科学是生产力。不仅应用研究可以直接为生产服务，“许多良好的基础研究工作把应用放在目标之中”②，也可以直接或间接地为国民经济的发展服务。我国厦门大学、中国科学院福州物质结构研究所、吉林大学、南京大学等单位，在化学模拟生物固氮方向上的选题，就是把基础研究与社会需要紧密联系起来的极好范例。

（2）量力而行与“厚板钻孔”相联系的原则

要完成任何一个具体的课题，研究者都必须有一定的理论准备、研究能力和物质条件。每一个研究者都应当根据自己三个方面的实际情况来选择课题。如果在这三方面的条件都不具备的情况下选择课题，研究工作是肯定不可能成功的。牛顿在他早期作出巨大发现之后，转而企图寻找超自然的力量和长生不老药。他闭门专攻炼金术达25年之久，虽然写下了洋洋65万字的炼金术著作，但在科学上并无建树。牛顿的失误，重要原因之一就是他“变得不那么专业化了”，离开了自己的专长，不谨慎地涉足他尚未掌握的领域③。

爱因斯坦曾对弗兰克（P. Flank）说过：“我无法容忍这样的科学家，他们拿起一块木板，专找最薄的部分在最容易钻孔的地方钻了很多孔。”④就是说，我们在选题

---

① 杨光伟：“著名化学家、教育家杨石先教授”，《化学通报》1980年第12期，51页。
② J.巴丁：“科学研究与工业发展”，《社会发展和科技预测译文集》，科学出版社，1981年，21页。
③ W.布罗德：“杰出的科学家如何走入迷途？”，《自然科学哲学问题丛刊》1984年第1期，92页。
④ *Reviews of Modern Physics*, Vol.21, No.8, p.350 (1949).

时，应该在力所能及的范围内，尽量选择那些难度较大，对经济或科学的发展有重大影响的课题。如果借用爱因斯坦的话来说，就是要选“厚板钻孔”。为什么呢？著名化学家威尔斯泰特说：“研究学问应从最难的入手，因为在探究最难问题的过程中，许多枝枝节节的小问题，都会迎刃而解。”① 1981年完成的酵母丙氨酸转移核糖核酸人工全合成的课题，不仅带动了有机合成的进展，研究总结出一些反应规律，同时还研制了一些核苷、核苷酸类药物，为国计民生作出了贡献②。

（3）持之以恒与灵活调整相结合的原则

选择和确定研究课题是科学研究的战略起点。但是，不能认为科研选题仅仅是科学研究刚开始时的工作。实际上，在科研进行到一定阶段，还存在着课题的再度确定问题。

对一个有意义的课题的研究，在经过一些失败之后，需要认真进行分析，若仍有成功的可能，则应坚持下去。在人工合成核酸的课题上，有一个可以比较的例子。美国学者G. 柯隆纳在六十年代完成了6核苷酸的小片断，这是一个良好的开端，但是他后来却放弃了全合成核酸的课题③。我国对这个课题的研究，虽经挫折，但由于选准目标之后坚持了十三年之久，终于获得成功。

面对重大课题，有经验的化学家有时也会产生胆怯心理。在这种情况下，需要自我加强成功的信心，而不应随便放弃课题。著名有机化学家R. B. 伍德沃德曾吐露过他在合成番木鳖碱时的心情和克服胆怯心理的体会。他说，当他陷入确定有关部分结构的细节的时候，觉得整个合成工作看起来显得特别巨大，似乎不可能成功。但是，在这类细节工作完成之后，如果把合成工作当作一个新鲜而又独立的问题来对待的话，就会感到并没有象原来所想象的那么可怕，成功的信心也就加强了④。

如果经过一段时间的研究，发觉一个课题确实不可能再研究下去，就应该当机立断，迅速放弃原有课题。第一次世界大战后，哈柏想起阿累尼乌斯曾说过海水里含有8亿吨黄金，便选择了从海水中提取黄金的课题。经过多次化学分析，他发现每吨海水里仅有千分之一毫克的黄金，没有提取价值，便马上放弃了这个课题⑤。

有时候，研究一个课题还没有多少眉目时，偶然的机遇可能会带来新的课题。如果这个新的课题更有意义，成功的可能性更大，则应迅速转而研究这个新的课题。柏金在皇家化学学院读书期间，利用假期在家里合成奎宁。经多次实验，得到的不是奎宁，而是一种不明产物。无意之中，他发现这种产物（后来命名为苯胺紫）是一种很好的染料，便敏锐地捕捉住这个机遇，放弃了合成奎宁的课题，改而专门研究合成染料，开创了人工合成染料的新领域。

任　定　成

2. 化学中的实验方法

人们依照研究目的，使用科学仪器和设备，有意识地去控制自然过程的条件，模拟

---

① 《诺贝尔奖金获得者传》（第一卷），湖南科学技术出版社，1981年，207页。
② 汪猷：“无涯之知　世代之功”，《红旗》1982年第4期，42—43页。
③ 参见《人民日报》1982年1月21日第3版，王应睐的文章。
④ R.B.Woodward：“番木鳖碱的全合成”，《化学译报》1957年第8卷第6期，595页。
⑤ 同①，211页。

自然现象，抛开次要矛盾，突出主要因素，在特定条件下去探索客观规律，从而认识客观世界。这种认识方法就是实验方法。实验是研究和认识自然规律的一种重要方法，它可以暴露自然过程或生产过程在天然条件下难以暴露的特性。实验方法，不仅是科学研究的重要手段，而且是科学发展的直接基础，推动和检验着自然科学的发展。实验方法也同样推动和检验着化学的发展。

实验是化学研究的最基本方法

自波义耳以来的三百多年中，化学的每一次重大突破，都与实验方法的改进密切相关。尤其十八世纪以后，由于定量实验越来越精密，促使化学飞速发展。因此，长期以来，化学被称为“实验的科学”。

十七世纪以前，化学以炼金术为主要内容，处于“原始形式”时，已出现了一些实验装置。当时的化学著作中，记载了不少有关熔化、焙烧、溶解、过滤、结晶、升华、蒸馏等操作方法。炼金术可称为一种原始的实验方法。“炼金术士设想的嬗变的实验有：在空气中焙烧贱金属矿石——方铅矿（硫化铅），当铅生成时，有强烈的硫黄气味；把铅在灰皿或骨灰造的盘子中加热，铅烧掉以后可得到一点儿银。如把黄铁矿（外表看来有点象黄金的黄色矿物）与铅共熔，铅用灰皿烧掉以后，剩下微量的黄金……。”[①]炼金家们极其重视热对物质的作用，在他们的著作中描述了各式各样的炉子，以及用它们所作的实验，其实验现象就是燃烧和焙烧。

在炼金术士原始实验的基础上，波义耳、胡克和梅猷，对燃烧和焙烧进行了一系列研究。波义耳是个出色的实验家，他改进了许多当时常用的仪器，进行了大量的实验工作，他曾在自己住宅后面建立过一个实验室。1661年，他发表的《怀疑派的化学家》就是一部建立在实验方法基础上的近代化学的启蒙著作，是对长期实验的总结。他曾和胡克合作进行燃烧实验。1673年，他在《关于火焰和空气的关系的新实验》中，讲到过一个真空容器中的燃烧实验。他对实验作法与观察到的实验现象，作了非常详细的叙述：“实验方法是把红热铁板放在钟罩下，用抽气机抽掉钟罩内的空气，然后用一个固定在钟罩颈部的装置把可燃物质降落到热铁板上。如用纸卷上硫黄下降到铁板上，只见冒烟不见着火。”[②]但是，当放进空气时，则仿佛见到有各式各样的小火花……。这促使他产生了一个想法：火焰不能离开空气而存在。同年，他又在《使火与焰稳定并可称重量的新实验》一文中，发表了关于焙烧实验的结果，指出金属在空气中焙烧，其重量增加……。他被称为近代化学奠基者的重要理由之一，就是他把严密的实验方法引入到化学中。

波义耳还做过各种各样的其它实验。发现了酸和碱的一些通性。他是定性分析的奠基者，曾描述过许多定性分析方法。如，铜盐使火焰带绿色；硝酸或盐酸遇氨气会产生白烟；银盐可被氯化物沉淀出来，等等。

十八世纪，拉瓦锡长期从事实验工作。特别是在普利斯特利发现氧气的基础上，通过种种燃烧实验，终于发现物质燃烧的氧化理论。推翻了“燃素说”，引起化学史上的

---

① J.R.柏廷顿：《化学简史》商务印书馆，1979年，41—42页。

② 同上，80页。

一场革命。

拉瓦锡的研究工作，特点在于重视定量实验方法；他使用天平，发现在空气中燃烧硫和磷，生成物重量增加。他在《物理和化学简论》中，曾描述过在倒置于水银槽中的钟罩里燃烧磷的实验。结果是钟罩内水银面上升，说明其中一些空气由于燃烧被吸收了。进一步实验表明剩下的空气不能使余下的磷在其中点着，并且还使燃着的小蜡烛放入其中便熄灭。经过精密称量得知：所生成的白色粉末（P_2O_5）比被燃烧的磷重了，增加的重量几乎等于所用掉的$\frac{1}{5}$体积的空气的重量。

拉瓦锡和拉普拉斯，在1783年还用冰量热计测量了比热、燃烧以及呼吸过程中所放出的热量，从而在理论方面和实验方面奠定了热化学的基础。

十九世纪上半叶，开始了化学发展的新飞跃，同样是以实验为基础的。道尔顿在长期从事气象观测和气体实验的基础上，创立了近代原子论。他计算出一些元素的相对原子量，并首倡化学符号。道尔顿是一位气体分析专家。他建立在实验基础上的重大成就，使他成为“近代化学之父”。

1828年，维勒由于实验中的机遇，实现了尿素的人工合成。这一发现突破了无机界与有机界的界限，给形而上学自然观打开了一个新缺口，导致十九世纪上半叶一系列有机合成实验的成功，为建立有机结构理论打下了坚实的基础。

门捷列夫以元素周期律“完成了科学上的一个勋业”①，在研究方法上，他同样是重视观察与实验。他认为“观察和实验是科学的躯体……”②。科学原理“也起源于实验的世界和观察的领域。”③

十九世纪末，居里夫妇从沥青铀矿中，首次制得放射性元素镭和钋，更是实验的直接结果。

二十世纪以来，理论化学的研究获得惊人的发展。数学方法、理想方法及逻辑等方法被广泛地引进化学。但是，理论推导和数学计算结果是否正确，仍然离不开运用实验方法去进行验证。理论化学的发展并没有削弱和否定了实验方法，相反地，实验手段不断改进并向仪器化、自动化迈进，新的实验方法、手段被普遍应用，已经成为现代化学发展的一个重要特点。

从古至今，实验的方法在整个化学发展中的地位和作用是非常重要的。在化学的任何一个分支中，都离不开实验。无论用什么方法研究化学，最终也都离不开实验。脱离实验，就不可能有化学的发展，因此可以说，实验方法是研究化学的最基本方法。

化学实验方法的特点

实验是各门自然科学中普遍使用的基本方法。各学科中的实验方法既有不少的共同点，又各有独到之处。化学实验方法的主要特点有以下几个：

（1）观察是化学实验成败的关键

任何实验方法都与观察方法有着密切的联系，观察是实验的基础，实验是观察的深入。然而在化学实验方法中，科学的、全面的观察尤其具有特殊的关键作用。

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，61页。

②、③ 张巨青等：《辩证逻辑》，吉林人民出版社，1981年，263页。

古代化学家所以能够有所发现，主要是他们能抓住观察到的自然现象、实验现象，深究不止，力图弄清其中之所以然。由于当时实验装置很简陋，所以主要靠观察自然现象，配合以简单的实验来研究问题。

在近现代化学中，虽然有了一些化学仪器，但多数还不是完全自动化的，需要实验者去使用这些仪器，观察并记录实验现象，事后在这些事实基础上分析和研究问题。

"善于观察"是化学工作者的基本功。不仅仅要能观察到客观上变化多端的实验现象，透过复杂的表面现象，探讨事物的内在本质；还要善于不断地抓住实验中的"异常现象"，加以分析研究，才能够有所发现。在实验中能否通过观察抓住"机遇"进一步研究问题，是化学工作者应具备的科学素质。

（2）环境因素是化学实验的重要条件

例如，我们制备$Al(OH)_3$时，会因为NaOH用量过多而得不到应有的白色沉淀。又如，在应用凝固点降低法测定萘的分子量时，会因为萘中有杂质（由于试剂不纯），而使测定结果产生偏差。有机合成实验，有时会因为温度、压力等条件不同，而得到完全两样的产品。

因此，在化学实验中，有时会由于无意之中条件未控制好，而使实验结果给人以某种假象。如果不能辨别出这些假象，将会由此导出错误的结论。这是应该尽量避免的。

为什么会出现假象呢？这往往是由于操作者对操作规程不熟练，或操作技术不过硬，没有严格控制好实验条件（如：温度、压力、试剂量、溶液浓度、药品纯度等等），或有偶然的外界因素存在而造成的。

此外，会出现某种一时难以捉摸的原因，致使实验出现"异常现象"。对于这类现象，就需要根据实验者详尽地记录的事实（条件、现象、数据等等），认真思考、分析，并设计再现实验，来检验分析是否正确。进而找出这个"难以捉摸"的原因。在这里，详细地记录还是促使细致观察的有效方法。这说明能如实地、详尽地记录实验情况，是实验者应养成的一个必不可少的良好习惯。

(3)经验是化学实验成功的有力基础

实验方法是人们有意识地变革自然对象的过程。它是在人们变革自然中反映自然，在对事物的分离过程中去认识事物的联系。实验是一个主观与客观相统一的过程。

化学实验是通过人的双手去使用各种仪器设备与药品，装置各种复杂的仪器进行各种化学操作等。显然，实验成功与否和实验者的经验多少有着密切关系。基于实验的经验归纳会导致化学规律的发现和化学概念的建立。搞实验工作的人，不仅要善于总结自己的工作经验，也要注意主动地吸取别人的工作经验。为此就必须熟悉文献的查阅，要掌握外文工具，要养成认真阅读各种科技杂志，和重视不断积累、整理资料的好习惯。

一份详尽的记录是积累个人工作的经验教训的必要条件。否则，实验失败会原因不明，若单凭记忆，去臆测失败原因，则往往是再次重复失败。既浪费了时间，又浪费了人力、物力。

"详尽的记录"，意思是不管你认为是 要的还是次要的东西，都统统记下来。要详细到过几个星期或几个月后，你一看这份记录，还能再现当时实验的情况。因为，有

时候一个实验的成败，往往取决于某些看来好象是次要的因素。所以详细不漏地记下实验时一切条件（包括你没控制好，有了变化的条件）和现象（特别是你认为是不正常的现象）是非常必要的一环。有了详尽的记录材料，才便于通过逻辑思维和科学抽象，总结出经验教训，使你逐渐成为经验丰富的人。化学研究工作者都把他的记录本看作是最珍贵的财产之一。应该把实验记录本妥为保存，这不仅对自己而且对其他化学工作者都是很有价值的。

(4)分析方法在化学实验中占有重要地位

十七世纪，波义耳把化学确立为科学，使化学成为一门以实验为基础的经验科学。最初，在化学中应用实验方法，主要是对一些天然的化学物质进行简单的分析、分离，制取和提纯。波义耳之所以能给化学元素下了一个科学的定义，主要是依据了他从事定性分析和定量分析的实验成果。直到十九世纪，化学实验主要以化学分析方法作为基本手段。

进入本世纪以来，在化学实验中逐步采用了仪器分析的方法。例如，光学分析法、电化学分析法和放射化学分析法等。在实验方法中，通过仪器分析不仅可以分析各种物质的组成成分，而且还能对物质的微观结构进行探测。

实验分析方法还是化学科学指导生产和技术的重要手段。比如在钢铁工业中，为要保证转炉炼钢的成功，就离不开炉前的快速分析。又如，在半导体技术中，进行原子级加工之所以能实现，主要是依靠了激光技术在检测单个原子方面所取得的成就。

化学实验在现代环境保护中所起的重要作用，同样是通过分析手段实现的。比如，应用分析查清了2-4联苯胺、3-4苯并芘、多核芳烃以及元素镉、铬等物质的致癌作用，促进了环境科学和医学的发展。

(5)化学合成是化学实验方法的重要内容

化学的实验方法不仅能分析和分离、提纯、制取自然界中的常见物质，而且通过合成方法能够仿制自然界存在较少的物质，创造许多自然界中不能存在的物质。从上一个世纪二十年代维勒人工合成尿素开始，化学实验方法以合成天然有机物为重要目标，把人类对化学物质的认识和改造推进到一个新的水平，促进了化学的发展。一个半世纪以来，化学合成已成了化学实验方法的重要内容，提高了化学实验方法的水平。现在世界上的化合物有七、八百万种之多，每年还要增加三十多万种。其中大多数是人工合成的。在有机合成方面，不仅能合成橡胶、纤维和塑料等高分子化合物，而且还合成了蛋白质、核酸等生物大分子物质。近几十年来无机合成方面也取得了巨大进展。根据需要合成了一系列重量轻、强度高、耐热性能好的无机纤维，如硼纤维、碳纤维和氧化锆纤维等。还合成了不少种类的高温无氧陶瓷，如氮化硅陶瓷、氮化硼陶瓷等都能耐1600℃的高温。现在军事上所用的压电陶瓷，也是主要由钛酸钡通过实验合成的。人造地球卫星、宇宙飞船上所用的耐高温过硬材料，均是由上述各种陶瓷与金属、无机纤维等做成的复合材料。

化学实验方法中，由于合成手段的飞速发展，今天已形成了一门重要的合成化学分支学科。合成化学实验，使人们积累了无数宝贵经验和资料，为化学理论的发展提供了丰富的素材。比如，在本世纪六十年代中期，人们在大量合成反应的基础上，利用量子化学的知识，总结出"分子轨道对称守恒法则"，成功地解释和预测了不少化学反应的

方向。

(6)化学实验方法通过移植而不断更新

在化学实验方法中，不断引进其它学科的方法，使传统的实验方法改变了面貌。

近代物理学、数学、电子学以及激光技术、等离子技术、微波技术、真空技术、分子束、傅里叶变换和电子计算机的急剧发展，革新和发展了化学实验中的仪器分析方法。例如，由于应用激光红外光源和干涉仪，并借用了快速傅里叶变换技术，红外光谱仪能把可测样品的灵敏度，由原先的毫克级提高到毫微克级。这种仪器被称为“分子的指纹”。而被称为“原子的指纹”的电子光谱仪与电子计算机联用，发展为现代各种的电子光谱仪，具有分辨率高、多用或专用的良好性能。核磁共振仪，因运用了超导和傅里叶变换技术，已经能够测定生物大分子和大多数元素原子核的核磁共振谱。借助于X射线激光器，人们通过全息X射线照像而直接看到晶体结构中原子的空间排布。电子计算机与分析仪器的联机使用，通过程序既可控制仪器的操作，又可以进行波形分解、基线校准、背景扣除，并及时处理数据、显示分析结果等，从而大大提高了实验分析的灵敏度和准确度，实现了仪器自动化和对样品的连续测定。例如，原子吸收光谱分析器，每批就可分析几十个样品；X射线荧光光谱仪每批可连续测定35个样品。电子计算机的应用，还可以开展如快速反应动力学等新分析方法的研究。激光的应用，特别是激光作为光源，应用于原子吸收光谱、发射光谱、原子荧光光谱和分子荧光光谱等，引起了化学实验中分析方法的巨大变革。

化学实验中引进激光技术，诞生了崭新的激光化学。主要研究激光如何引发和控制化学反应。传统的化学实验方法，由于条件所限，很难探测复杂化学反应的微观过程。诸如，反应物分子的激发，分子间的碰撞，激发态分子的发光，相互碰撞分子的能量转移，化学键的破裂、形成，以及伴随这些过程所发生的能量变化和分配等。自从引进激光之后，情况大变。利用激光形成的超短脉冲，能以非常快的速度在极短的时间内将分子激发到某一微观过程的初始状态，并对这一初始状态随时间变化的过程进行“快速摄影”。由此出现的“激光动态光谱”技术，目前已广泛地用于研究有机化合物中能量转移和传递过程，并揭示了分子的空间取向及其发生电荷转移的规律，为研究基元反应动力学提供了广阔的前景。把激光技术与分子束结合起来，形成的“激光分子束光谱”方法，可以研究分子的各种碰撞过程中进行能量传递及化学键断裂、生成的细节等微观反应动力学问题。此外，激光用于同位素分离以及红外光化学等方面均取得了可喜的进展。

近几十年来，化学实验方法由于在分子水平上模拟生物在自然条件下进行复杂的化学反应，使实验具有快速、稳定和准确等特点。这种实验方法奠定了化学仿生学的基础，化学仿生学模拟生物体内的化学反应过程，模拟生物体内的物质输送过程，模拟生物体内的能量转换和信息传递过程。所谓生物固氮的化学模拟，就是用化学的方法模仿生物的固氮功能，目的是提高含氮化合物的生产效率。我国在固氮酶的研究方面业已取得了重大成就。

这些进展说明，传统的化学实验方法，由于移植了其它学科的研究方法，而处于不断更新之中。

王淑萍　乔世德

3. 分类法和分子的分类

分类法是一种重要的科学方法

分类法是对已经掌握的大量研究对象进行分析和整理，并按照它们的本质属性或主要特征，将其区分为不同的类别，从中找出研究对象之间的规律性联系的一种科学研究法。分类法是人类认识自然界，进行科学研究的最基本的方法之一。它的作用至少有三方面：

(1)分类法可使复杂的事物系统化、条理化。

自然界的事物千千万万，如已知的动物有100多万种，植物有30多万种，分子有700多万种。如果没有分类法对其进行研究，自然界的千千万万事物就显得杂乱无章，茫茫一片，对它们之间的规律性的联系就无从认识。所以分类法的第一个作用，可以对人们在大量的生产实践和科学实验中积累起来的丰富而繁杂的材料进行整理、编组和排队，使之条理化、系统化，从而为进一步的科学研究创造有利的条件。

在科学技术发展史上，运用分类法取得重大成就的事例是屡见不鲜的。例如我国伟大的科学家李时珍，化了几十年的心血对大量中草药进行详细观察、采集、试种、炮制和临床试验，取得了大量可靠的第一手材料。在这个基础上，他改进了以前的分类法，做到"振纲分目，纲目分明"，终于写出了《本草纲目》这一伟大著作。又如林奈提出了动物、植物的系统分类法，在分类的基础上创立了二名法，即在动植物的常用名词之外，提出一套纲目分明的系统学名。恩格斯对此予以高度评价，认为"自然科学的发展，即使到了十八世纪，在生物学领域内，最主要的成就也只有植物学和动物学由于林奈而达到了一种近似的完成"①。

著名化学家门捷列夫也正是运用了分类的研究方法，对各种化学元素的性质进行了分门别类的研究，从而发现了元素周期律。

（2）分类法能突出事物的主要矛盾，导致对事物本质的深入了解。

分类，作为客观事物的反映，有一个从现象分类到本质分类，从不甚深刻的本质分类到更深刻的本质分类，这样一个逐步深化的过程。例如门捷列夫提出的周期律，原先认为元素的性质是它的原子量的周期函数。后来由于莫斯莱的X射线光谱的研究，认识到元素的性质是它的原子序数的周期函数。所谓原子序数就是原子核所带的正电荷数或核外电子数。元素的性质既然是核外电子数的周期函数，那么核外电子的排列很可能也是周期性的，这就导致玻尔提出原子的壳层结构理论。玻尔理论的提出，为量子力学的建立提供了一个重要的基础。

伟大的生物学家达尔文，在继承林奈分类学的基础上，通过长期广泛的科学考察，搜集积累了大批资料，用分类的科学方法，进行整理对比的研究结果，发现了各类生物物种之间的本质的规律性的联系，建立了有名的生物进化论。现代分子科学提出的遗传密码理论将使生物的分类学提高到分子水平上来。不久的将来可能提出基因分类学，使生物的分类法深化到更为本质的层次。

(3)分类法能预见新事物。

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，10页。

例如元素周期律预见了不少新元素，后来都陆续发现了。在物理学中，已经发现了三百多种所谓“基本粒子”，物理学家对它们进行了分门别类的研究和探索，提出了科学的分类法，并预见了一些尚未发现的新的基本粒子。

例如1962年盖尔曼从重子的分类表中的空缺中预言有Ω^-粒子，它的电荷$Q=-1$，奇异数$S=-3$，质量为1680兆电子伏，自旋为3/2，宇称为E。两年后，在布鲁克海文实验室发现了这种粒子，恰好具备上述性质。

“基本粒子”既然有三百多种之多，它们之间又有内在的联系，这说明“基本粒子”并不“基本”。它们还有内在的结构，这就导致了比“基本粒子”更深的一个层次“夸克”。现在提出的夸克已经有36种之多。对夸克也在进行分类，使人类的认识一步步地深化。

在分子生物学中，基因分类学的提出将为切割、剪裁、移植和创造新的基因，发展遗传工程和创造人类需要的生物新物种提供十分广阔的前景。

分子分类法的探索

(1)化学研究重点的转移

在十九世纪，化学被认为是原子的科学，物理是分子的科学。现在化学的重点已转到研究数以百万计的分子，因此似乎可以倒过来说，化学是分子的科学，而原子的科学却成为物理学的某些分支——原子物理学、核物理学、高能物理学、量子场论等等。

（2）分子的“树枝式”分类法

现在已知的分子有700多万种，并且正在以平均每天合成或发现1000多种新分子的速度增长，所以研究分子的科学分类法，搞清各类分子之间的内在联系并预见未知的新分子，已成为刻不容缓的事了。现在通行的分子[①]分类法是把分子分为无机分子和有机分子两大类。有机类又分为脂肪族和芳香族两类。脂肪族又分为羟、醇、醚、酮……等各类。这种分类法和动植物的门、纲、目……分类法类似，可以称之为“树枝式分类法”。

树枝式分类法无疑是一种最基本的分类法，但也有它不足之处。首先，无机分子和有机分子之间就没有一条明确的分界线。其次，在近二十年来飞速发展的金属有机化学，原子簇化学，配位化学，生物无机化学等领域中，人们正在建立有机化学与无机化学之间的桥梁。传统的树枝式的分子分类法显得不够了，探索新的分子分类法的课题就提到日程上来了。

(3)分子的“多维”分类法的探索

除了“树枝式”分类法外，另一种分类法可以叫做“多维”分类法。例如在人口调查中，按年龄、性别、民族、籍贯、职业等五个要素来登记，就是“五维”分类法。又如周期律对原子的分类法可以称之为“二维”分类法，即以原子的价电子数x为横坐标，以周期数y为纵坐标，把各种原子归入xy的二维坐标系中的方法。分子的数目要比原子多几万倍，用二维分类法显然是不够的，那么是不是可以采用多维分类法呢？在多维分类法中应该采用哪些要素才能抓住分子的本质属性。这是一个需要思索和值得探讨的问题。首先，组成分子的原子种类一定是一个重要的要素。事实上，无机化学中树枝式的

---

① 本文中，“分子”一词是广义的，包括NaCl晶体这样的巨型分子在内。

分类就是把原子的种类作为第一个要素来进行分类的。为了建立一个与树枝式分类法可以互相补充的新分类法，笔者考虑不把原子的种类作为一个要素。笔者认为分子的结构应该是分子的最重要的本质属性，它可以决定分子的许许多多性能。分子是由原子结合而成的，正像房屋是由砖瓦、水泥、木材和钢筋组成的一样。现代房屋建筑中多采用“预制件”，在分子的建筑术中有没有预制件呢？从一百多种原子到几百万分子之间有没有一个“分子预制件”的层次呢？我们认为引进这样一个可以叫做“分子碎片”或简称“分子片”的层次，对于为数众多的分子的分类是十分有利的。

(4)分子片的概念

长期以来，化学家在原子和分子之间早已提出了一些中间层次的概念。例如无机化学中硫酸根（$SO_4^=$），碳酸根（$CO_3^=$）等，有机化学中的功能团，以及近年来科里（Corey）等提出的“合成子（synthon）”。分子碎片（molecular fragment）的概念则是霍夫曼（Hoffmann）等首先提出的。他对各种分子片的电子结构，分子轨道的形状和能级进行了大量的计算，并提出等叶片相似性的概念[①]。

分子的（nxcπ）分类法和结构规则

在分子片概念的基础上，作者为了总结原子簇化合物的结构规则，在1982年的中日美三国金属有机化学讨论会上提出了分子的（nxcπ）四维分类法及有关的七条结构规则[②]。现在把这个分类法的要点补充说明如下：

（1）在此分类法中，数以百万计的各种有机和无机分子被认为由若干分子片M^i所组成。每一分子片M^i则由一个中心原子A^j和若干个配体L^k所组成，此处i、j、k为价电子数，它们有一定的计算方法。[③]

$M^i = A^jL^k$，$i = j + k$

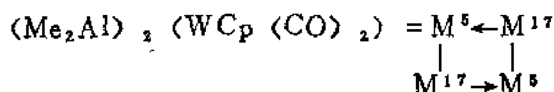
例如 $CH_3 = A^4L^3 = M^7$，$OH = A^6L^1 = M^7$，

$Mn(CO)_5 = A^7L^{10} = M^{17}$，$Co(Cp) = A^9L^5 = M^{14}$

上式中Cp代表环戊二烯基（C_5H_5），它是提供5个电子的π配体。下面是由分子片组成分子的一些例子：



$CH_3-CH_2-CO(CO)_4 = M^7-M^6-M^{17}$



$(Me_2Al)_2(WCp(CO)_2) = \begin{matrix} M^5 \leftarrow M^{17} \\ | \quad\quad | \\ M^{17} \rightarrow M^5 \end{matrix}$



$Mo_2Cl_8^{4-} = (MoCl_4^{=})_2 = M^{12} \equiv M^{12}$



$C_2B_4H_4(CoCp)_2 = (CH)_2(BH)_2(CoCp)_2 = M_2^5M_2^4M_2^{14}$

（2）分子片M^i可按它的价电子数i的多少分为25类，即M^0，M^1，M^2，……M^{22}，M^{23}，M^{24}。在同一类分子片$M^i = A^jL^k$中，又可因A^j所属周期不同而分类，例

① R. Hoffmann, *Nobel Lecture*, 1981.

② 详见：徐光宪，*Proc. Second China-Japan-U.S.A. Symposium on Organometallic and Inorganic Chemistry*, p. 101 (1982).

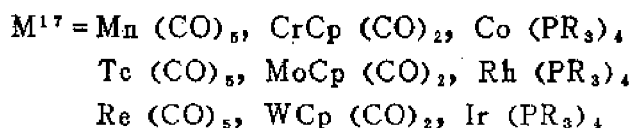
徐光宪：《化学通报》，1982年第8期，490页；1982年第9期，570页；1982年第11期，656页。

徐光宪：《高等学校化学学报》，1982年第8期，专刊，114页。

徐光宪：《分子科学与化学研究》，1983，3 (2)，1；*J. Molecular Science*, 1 (1), 1.

③ 徐光宪，《化学通报》，1982年第8期，490页；1982年第9期，570页；1982年第11期，656页。

如：



$M^{17}=Mn(CO)_5$，$CrCp(CO)_2$，$Co(PR_3)_4$

$Tc(CO)_5$，$MoCp(CO)_2$，$Rh(PR_3)_4$

$Re(CO)_5$，$WCp(CO)_2$，$Ir(PR_3)_4$

这样分子片就可用二维分类法排成周期表的形式。

（3）定义分子片的价V_i为中心原子价轨道层中在形成分子时接受的共享电子数，在大多数情况下，也就是价轨道层中的空位数，即

$$V_i=2(NVO)_i-i \qquad (1)$$

上式中$(NVO)_i$为中心原子的价轨道数。大多数主族元素如C，N，O，F等采用 4 个价轨道，所以

$$V_i=8-i \qquad (2)$$

大多数副族元素采用 9 个价轨道，所以

$$V_i=18-i \qquad (3)$$

（4）分子的结构类型由四个数（$nxc\pi$）决定，其中：

n = 分子中包含的分子片数　　(4)

c = 分子结构中的环数（number of cycles）　　(5)

π = 多重键的数目　　(6)

x = 分子的超额电子数 $=\sum x_i$　　(7)

x_i = 分子片M^i的超额电子数

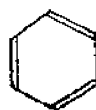
$=4-V_i$　　(8)

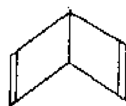
将（2）（3）两式代人（8）式，得

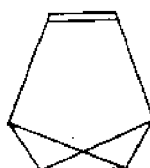
$x_i=i-4$（大多数主族分子片）　　(9)

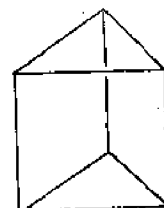
$x_i=i-14$（大多数副族分子片）　　(10)

例如C_6H_6分子由 6 个（CH）即M^5分子片所组成，M^5分子片的$i=5$，$x_i=5-4=1$，$x=\sum x_i=6$，所以C_6H_6的$(nx)=66$。C_6H_6分子有不少同分异构体，可用$c\pi$值的不同来区分，例如：









$nxc\pi=6613$　　　6622　　　6631　　　6640



$CH\equiv C-CH=CH-CH=CH_2$，$nxc\pi=6604$

上式中苯有 1 个环 3 个π键，所以$c\pi=13$，余类推。

（5）分子片之间的键数B等于总价数$V=\sum V_i$除 2，即

$$B=V/2=\frac{1}{2}\sum V_i=\frac{1}{2}\sum(4-x_i)=2n-x/2 \qquad (11)$$

对于含有n个分子片的链状饱和分子：

$$B=n-1，\ x=2n+2=x_{max} \qquad (12)$$

对于其它结构类型的分子

$$B = n - 1 + c + \pi \tag{13}$$

$$x = 2n + 2 - 2(c + \pi) \tag{14}$$

联合（11）和（13）式，得：

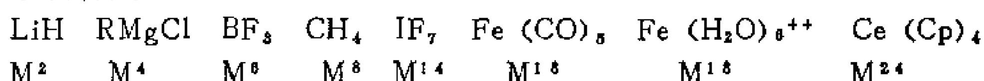
$$c + \pi = n + 1 - x/2 \tag{15}$$

以上五式适用于除闭式三角面多面体以外的各种结构类型。对于闭式三角面多面体，可以给出：

$$x = 2,\ B = 3n - 6,\ c = 2n - 5,\ \pi = 0 \tag{16}$$

（6）利用（nxcπ）四个数可以把所有分子分成以下各种类型：

①单片分子（n = 1），例如：

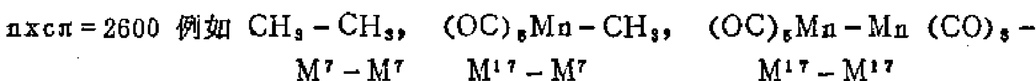


LiH　$RMgCl$　BF_3　CH_4　IF_7　$Fe(CO)_5$　$Fe(H_2O)_6^{++}$　$Ce(Cp)_4$

M^2　M^4　M^6　M^8　M^{14}　M^{18}　M^{18}　M^{24}

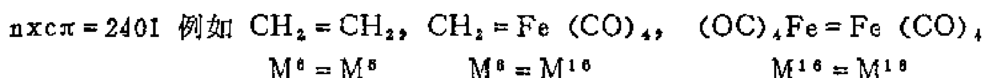
②双片分子（n = 2）

由（12）式，当n = 2时，$x_{max} = 2n + 2 = 6$。由（14）式可见，每增加一个π键，x就要减少2，因此通常的双片分子有下列四种类型：



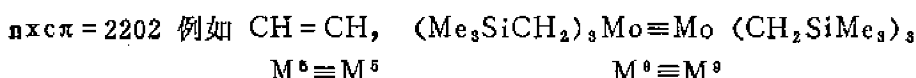
nxcπ = 2600 例如 CH_3-CH_3，$(OC)_5Mn-CH_3$，$(OC)_5Mn-Mn(CO)_5-$

M^7-M^7　$M^{17}-M^7$　$M^{17}-M^{17}$



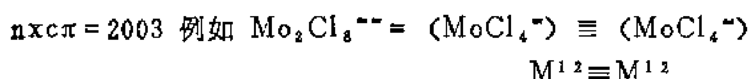
nxcπ = 2401 例如 $CH_2=CH_2$，$CH_2=Fe(CO)_4$，$(OC)_4Fe=Fe(CO)_4$

$M^6=M^6$　$M^6=M^{16}$　$M^{16}=M^{16}$



nxcπ = 2202 例如 $CH\equiv CH$，$(Me_3SiCH_2)_3Mo\equiv Mo(CH_2SiMe_3)_3$

$M^5\equiv M^5$　$M^9\equiv M^9$



nxcπ = 2003 例如 $Mo_2Cl_8^{--} = (MoCl_4^-) \equiv (MoCl_4^-)$

$M^{12}\equiv M^{12}$

③n片分子

可按c值不同分为链状分子（c = 0），环状分子（c = 1），多环网络（polycyclic network）（c≥2）和原子簇（clusters）（c≥3），每一种又可按π值不同而分类。表4.1列出含有n个分子片的各种结构类型的xBcπ值。

④复杂分子

除了链，环，网络和各种闭式、巢式、网式三角面多面体，非三角面多面体外，还可以由这些结构单元组合而成复杂分子。这样就可把全部分子包括在（nxcπ）分类系统中了。

（7）取代原理

等价分子片可以互相取代而不改变分子的结构类型。例如P_4，As_4，$(CR)_4$等为四片分子（tetra-fragment molecules），其通式为M_4^5，总价电子数NVE = 20，（nxcπ）=（4，4，3，0），结构类型为正四面体，则其中M^5被$M^{15} = Co(CO)_3$，$FeCp(CO)$，$Ir(CO)_3$等分子片所取代，生成$(RC)_2[Co(CO)_3]$ $(OC)_2[Co(CO)_3]_2$，$(RC)[Co(CO)_3]_3$，$[Co(CO)_3]_4$，$[FeCp(CO)]_4$，$[Ir(CO)_3]_4$等一系列四片分子，其结构类型保持四面体不变。

分子中有几个分子片被相同数目的别的分子片所取代，只要分子的总价电子数

表4.1 各种结构类型的$x_n c \pi$值

结构类型	x	n	c	π
饱和链	2n+2	n−1	0	0
饱和环	2n	n	1	0
共轭多烯	n+2	3n/2−1	0	n/2
共轭多炔	2	2n−1	0	n
轮烯 (annulenes)	n	3n/2	1	n/2
闭式碳烷（如立方烷等）	n	3n/2	n/2+1	0
闭式—△—多面体（i=0）	2	3n−6	2n−5	0
巢式—△—多面体（i=1）	4	2n−2	n−1	0
网式—△—多面体（i=2）	6	2n−3	n−2	0
j帶帽—i—开式—△—多面体	2(1+i−j)	2n−(1+i−j)	n−i+j	0

NVE不变或只相差10的倍数，则结构类型不变，例如两个M^5分子片可被M^4+M^6或M^4+M^{16}或$M^{14}+M^6$或$M^{14}+M^{16}$所取代而保持结构类型不变，如$H_2Ru_3(Co)_9S$=〔$HRu(CO)_3$〕$_2$〔$Ru(CO)_3$〕〔S〕=(M^{15})$_2$(M^{14})(M^6)，NVE=50，与M^5_4分子的NVE=20相差30个电子，为10的倍数，所以同属四面体结构类型。利用这一广义等电子取代规则可以预见许多尚未合成的新的原子簇化合物。

上述（nxcπ）分类法和结构规则，在由分子式估算分子的结构类型，预见新的原子簇化合物和金属有机化合物，探讨它们的反应性能等方面，有着广泛的应用。

徐 光 宪

4. 归纳、演绎与化学

归纳和演绎作为一对普遍适用的逻辑方法，在化学研究中得到了广泛运用。同时，化学作为一门独立的学科，使归纳和演绎的运用又具有了其特殊性。因此不仅应该重视，而且应该研究它们在化学研究中的运用。

归纳和演绎在化学中的运用情况是复杂的。概而言之，下面三个问题值得论及。

归 纳 与 化 学 实 验

化学，早在独立之前，就显示了它的某些实验特点。近代，它尤其突出地表现了其实验性。二十世纪，它虽然在不同侧面展现了其理论色彩，但实验仍是研究的主要手段；可以预料，今后化学的研究仍然离不开实验。

归纳的基本推理过程是“由个别到一般、由事实到概括”[1]。无论是实验方案的设计，还是实验结果的整理，都在一定程度上表现出了这样的过程。因此，化学鲜明的实验性特点决定了归纳在化学研究中的重要作用。

① 罗森塔尔、尤金：《简明哲学辞典》，三联书店，1973年，708页。

实验之始，是实验设计。有人认为，这是实验成败的关键。虽然实验设计是一种创造性活动，但它并非凭空产生，而是直接植根于对已有实验的广泛借鉴和归纳。

"实践一开始就是社会的实践，是历史发展着的实践。"① 作为实践形式之一的化学实验也是这样。

实验是社会性的实验。化学史上若干事例表明，围绕某一课题，往往有许多人不约而同地进行实验。他们各从不同的角度表现了自己的深刻见解，各在不同的侧面取得了某些成功。这些见解和成功对于尔后的同类实验，无疑是可取的。因此在设计新的实验时，广泛地归纳这些实验过程是必要的。拉瓦锡就是在总结了当时的许多燃烧实验之后，才提出较新的实验方案，进而提出氧化燃烧理论的。唯物辩证法也表明，事物间总是相互联系的。同样，不同类的实验之间也是这样。对于一个崭新的实验而言，其目的可能显著地不同于其它实验，但在形式和某些内容上则可能联系密切，表现出了可借鉴之处。因此，在设计新的实验时，有所侧重地归纳同时代人在该方面实验的情况也是有益的。

实验也是历史地发展着的实验。它作为一种研究形式经历了一个由简单到复杂、由不成熟到系统的历史发展过程；在研究内容方面，实验也经历了由浅入深、由定性到定量的过程。现在，化学实验已具有系统的形式和深入的内容了。对于历史，应该坚持继承和批判的统一。过去的实验，虽然形式简单、内容肤浅，但仍会给今天的研究工作以可贵的启示。至于和今天的研究内容相近的那些实验，则更是有其借鉴作用。因此，在进行新的实验设计时，通过查阅、分析较为系统的资料，去归纳历史上的同类实验也是必需的。

归纳在实验设计中的作用如此，在整理、加工实验材料时的作用还要突出。

应该说，实验的主要目的是搜集表现事物本质的现象。如何从实验所得的众多现象中引出固有的本质并形成初步的理论，是有多种方法可用的。但其中重要的还是归纳法。这是由归纳的思维行程所决定的。归纳意味着从个别到一般。在化学实验中，由于实验条件的限制，其结果也可能从不同的形式出现。但通过归纳，由事实到概括，可抽象出共同点、上升为本质规律。1787年，拉瓦锡在对某些酸进行研究的基础上，运用归纳得出结论，认为酸是一种含氧的化合物；接着，戴维归纳了较多的事实，指出，氢才是酸不可缺少的组元；再后，阿伦尼乌斯基于更多的实验事实，进行归纳，提出了经典的酸、碱概念；不久，布朗斯特（Brönsted）和劳瑞（Lowry）又在他们的基础上进一步归纳，提出了酸、碱的质子概念，这是经典概念的进一步拓广；到1923年时，路易斯指出，酸是能接受电子对的任何物质，碱是能给与电子对的任何物质。这已是较为广义的酸碱理论了。这是对酸碱化合物较为全面的归纳，是比较接近于本质的概括了。

当然，在化学研究中，归纳的上述作用应该辩证地看待：（1）作为经验方法的实验和作为理性方法的归纳，在时间先后顺序上，并不是机械地前者先、次者后。它们在具体的研究中，有时表现为边实验、边归纳；有时甚至是先归纳、后实验，亦即先预想实验可能出现的多种结果，再进行归纳，然后以实验证明之。（2）通过归纳所得到的结果并非必然正确。必然性的产生只是在研究对象的全体被把握之后，这就是完全归

---

① 肖前、李秀林、汪永祥：《辩证唯物主义原理》，人民出版社，1981年，316页。

纳。然而一般情况下，这是不可能的。对事实的不完全归纳则是常有的。实践证明，运用不完全归纳所得到的结论往往是或然的。所以归纳的结果常以假说的形式出现。（3）归纳的过程不是单一的，要想使归纳的结果获得较大概率的正确性，必须在归纳中，辅以分析、比较等其它逻辑方法。

在化学研究中，按个别与个别、个别与一般的关系可分为两类。

首先是静态归纳。它是对同时存在的，且具有平行关系的对象的归纳。门捷列夫发现元素周期律时，所运用的归纳可属这一类。

到1869年，化学元素已被发现了六十三种，并且人们对它们的原子量和化学性质也有了较深入的认识。这就是门捷列夫得以归纳的基础。归纳中，他没有注重以至根本不考虑对这些元素的制得过程和认识过程，而是着眼于元素的现状和同时存在。在他1869年所发表的《元素性质和原子量关系》一文中，就蕴含了这样的推理过程：元素的比重与原子量有一定的周期函数关系，元素的熔点和化合价等也有与原子量的周期函数关系，所以元素的性质与其原子量有着周期性的函数关系。同样，单质的性质与原子量有着周期性函数关系，化合物的性质与原子量亦有这种关系，故元素及化合物的性质都是与元素原子量有周期函数关系的。

可见，静态归纳是比较简单的归纳，也可称为形式的归纳。它所涉及到的个别与一般的关系"是客观世界中个体与种、种与属的关系。这种个别和一般是同时存在的，不涉及被研究对象的发展过程或发展阶段的关系。"①

另外是动态归纳。它是对先后出现的实验现象发展的归纳。碳四面体构型假说提出时所运用的归纳便是这一类型。

十九世纪初，法国化学家毕奥发现了某些天然有机物的旋光性，向人们提出了旋光性与什么相关的问题；四十年代，巴斯德根据对某些有机晶体的研究，怀疑半面晶的存在是产生旋光性的原因；六十年代，威利森努斯根据对乳酸等的研究，指出旋光性可能产生于原子在空间的不同排布。在这前后，也有人试图从原子的平面排布来说明旋光性。最后是范霍夫总结前人的实验，肯定了旋光性与空间结构的关系，并提出了碳四面体构型假说。这是一个逐步归纳的过程。用半面晶解释旋光性只适于个别事物，用平面结构解释旋光性已具有特殊性；而用空间结构来解释则是一般了。特殊是作为个别和一般的中间环节出现的，故"从个别到特殊，从特殊到一般的思维运动"②正是归纳的思维行程。

显然动态归纳比静态归纳大大前进了一步，是一种科学的归纳，或说是辩证的归纳。它所涉及到的个别和一般的关系较为复杂，"不表现个体与类或种与属的关系，而表现对象的发展过程的不同发展阶段的关系，即低级阶段和高级阶段的关系。"③由于这样，动态归纳所得到的结果比静态归纳具有更大的必然性，不致于"以偏概全"或"轻率概括"④。

---

① 张巨青等：《辩证逻辑》，吉林人民出版社，1981年，126页。

② 肖前、李秀林、汪永祥：《辩证唯物主义原理》，人民出版社，1981年，421页。

③ 同①。

④ 中国人民大学哲学系逻辑教研室：《形式逻辑》，中国人民大学出版社，1980年，150页。

演 绎 与 化 学 理 论

化学理论的形成、发展和运用有着这样的一般过程：人们首先在对化合物或单质的性质及变化规律的经验摸索中，得到某些一般看法或猜想，接着用具体的实验和推理证实，使之上升为定律、理论；随之使这些定律、理论展开成为体系，并得到发展；最后将其运用于实际。

演绎是指这样的推理过程：从一大类属关系出发，推出某一具体的种，也即由一般推出个别。它是建立在这样的客观基础之上的，一般寓于个别之中，一般也包含了个别，某一大类所具有的属性，该类中的某一种必然会有。因此，这样的推理是必然推理，其结果往往是正确的。

由化学理论的发展过程和演绎推理的过程所决定，和归纳与化学实验的关系一样，演绎与化学理论的关系也是极为密切的。具体说来，演绎有以下三方面的作用。

（1）通过演绎，形成理论

演绎的基础是一般结论。如果这一般结论表现为假说或猜想时，就需要通过演绎找出个别实例来充当检验物，予以证实。充当检验物的个别和作为演绎基础的一般，若属性一致，则可使假说或猜想上升为理论；反之，则被证伪，需要提出新的假说。前者，如1875年，门捷列夫预言的“类铝”（即镓）被发现的时候，他的元素周期律就初步被证实了。后者，如十九世纪中叶以后，在发酵问题上，一直是“活力论”，亦即一切物质的发酵都是由细胞引起的观点占上风。上世纪末本世纪初，德国化学家布赫纳（E. Bucher，1860—1917）在充分研磨酵母、捣碎细胞的情况下，实现了酒精的发酵，并证明了酒精的发酵是个酶催化的过程，完成了证伪，否定了发酵问题上的“活力论”①。不过，化学理论形成的事实表明，上述只是两种极端情况。一般情况下，假说通过一次或几次演绎，既不能完全被推翻，也不能全面被证明，只能进一步明确其适用范围，导致出相对真理。虽然通过演绎所证明的理论，其正确性只是相对的，但这足以反映演绎在化学理论形成中的作用。

（2）通过演绎，发展理论

一般说来，在假说的基础上，通过演绎所得到的理论只具有定律、公式的形式，并非系统的理论体系。而要做到这点，仍然依赖演绎。

随着公理化思潮的发展，它的影响在化学领域里也得到了一定程度的体现。有些化学分支就是从一条或数条公理出发，主要通过演绎而形成了庞大的理论体系。化学热力学的诞生就是这样。热力学三定律是十九世纪人们在研究热机和进一步科学实验基础上，归纳得出的科学定律。它们构成了热化学演绎的基础。例如，根据热力学第一定律，或说能量守恒定律，演绎推导出了热化学方程式、热化学反应的基本规律——盖斯定律，还推导出了反应热与温度的关系——基尔霍夫定律。而热化学方程式和上述定律已差不多构成了化学热力学体系的骨架。

（3）通过演绎，指导合成

---

① A.斯字特格伦：“诺贝尔化学奖”，载《科学与哲学》（中国自然辩证法通讯杂志社编）1981年，第4、5期，200页。

可以认为，实现化合物的人工合成是人们研究化学的目的。它正是以化学理论为基本前提，通过复杂的演绎步骤而实现的。最初的人工合成，就组成、结构而言，具有较大的模拟性，基本是模仿天然化合物进行的。这似乎反映不出其间的演绎性，更多地体现了类比。但就合成途径而言，则是以基本的化学反应规律为指导，鲜明地表现出了演绎性质。现代的化学合成则大大超出了模拟的范围，它不仅在合成途径上，需要化学反应的基本规律作指导；在组成、结构上，也需依据结构—性质的相关规律；至于仪器、设备的使用，就更依赖于若干实验理论的指导了。所有这些，都是以演绎为其方法论基础的。

维生素B_{12}的得到，可称得上现代化学合成的杰作。它分子量大、结构复杂，因此，合成途径十分曲折。鉴于分子轨道对称守恒原理在解释和预示一系列化学反应方向时，是一个很有威力的工具，尤其是对立体定向反应具有指导作用。因此在人工合成维生素B_{12}时就充分运用了这个原理作指导，从而获得成功。因此，从一定意义上可以说，由分子轨道对称守恒原理这“一般”推出了维生素B_{12}这“个别”。

演绎在化学中的作用，无论是形成理论、发展理论，还是指导实验，其逻辑推理的思维行程皆表现为从一般到个别。因为一般和个别的关系有所不同，故这总的演绎推理又可分为两种。

发散演绎，亦即形式的演绎。其中所涉及到的个别和一般的关系和静态归纳中的一样，是同时存在的，没有发展过程或阶段的关系，只不过是静态归纳的逆运算罢了。具体说来，它是从某一一般结论出发，向从属于这一结论的许多要素进行推理的过程。因为它是由一般向诸要素的演绎过程，能更多地得到个别，所以在形成理论中有加速的作用；在发展理论中，有扩大理论面的作用；在指导合成中，有发现新物质的作用。门捷列夫元素周期律的建立，为人们提供了元素间联系的一般理论。从这一般理论出发，发现新元素的过程，实质上是一个发散演绎的过程。1875年发现了“类铝”（镓），1879年发现了“类硼”（钪），1886年又发现了“类硅”（锗）。这都证明了门捷列夫运用演绎的效益。后来，以拉姆赛为代表的一些化学家，在仿效门捷列夫向未知元素的演绎过程中，又发现了不少新元素。显然，这些新元素（个别）和元素（一般）是同时存在的，而且新元素间的关系是并列的。

链式演绎，人们又称为辩证的演绎。它是从某一一般结论出发，向某一阶段，进而向该阶段的下一阶段进行连续推理的过程。在这样的推理中，个别和一般有着“低级阶段和高级阶段的关系”，“先行和后继的关系。个别与一般的这种特点决定着不能把凡是一般所具有的属性，都机械地、毫不例外地肯定为个别所具有，因为一般所具有的属性不必为个别所具有。”① 链式演绎的进行，使推理越来越深入，使事物越来越基本、越来越具体。这种推理在有机化学的研究中较为突出。有机化学的基本任务之一就是确定未知化合物的空间结构式。而其途径就是从任何物质都具有空间结构这“一般”出发逐步演绎的过程。面对一个待研究的未知有机物，首先是提纯，排除它物；接着是分析，得到其基本的元素组成；再接着进行分子量的测定，得到各元素在此化合物中的定量组成；最后进行结构测定，确立其空间构型。至此，构成了有机化学研究的一种逐级演绎

---

① 张巨青等，《辩证逻辑》，吉林人民出版社，1981年，126—127页。

形式。

发散演绎和链式演绎尽管都是从一般向个别的推理，但仍有其明显的差别。前者中，一般和个别是同时存在的，个别之间也是并列的，因此，由一般向个别的推理呈明显的发射状。后者中，一般与个别间以及个别之间都有先行和后继的发展关系，不是并列的，故推理呈现链状。然而，这两种演绎形式又是相互补充的。在形成和发展理论时，只有通过发散演绎，向侧面发展，理论才有广度；只有通过链式演绎，向纵深发展，理论才会深化。如前所述，化学热力学就是从热力学的两条基本定律出发，通过链式演绎和发散演绎两者的结合，才构成了一个有机联系的理论体系。

归纳与演绎的关系

逻辑方法在自然科学研究中的运用从来不是单一的，往往是两种、甚至是更多种方法的同时并用或配合使用，只不过以某一种为主罢了。归纳和演绎在化学研究中的运用也是这样。大体说来，有如下两种情况。

（1）从化学研究的基本途径看归纳和演绎的串连使用，亦即先归纳、后演绎。

总体看来，化学研究遵循着这样的基本途径。首先是人们根据自己研究的目标，依据一定的理论基础，设计并实施实验；再从实验数据或现象中得到假说；假说正误与否，还得凭借实验证明，有时也包括理论证明，使之上升为新的理论；最后又用这种新理论指导实验，完成新化合物的合成。总之，走过了实验—假说—理论—指导合成新化合物（新的实验）的道路。化学研究尽管在形式和内容上具有极其复杂的多样性，但其过程都离不开上述基本形式。不难看出，这一过程本质上就是从个别到一般，再到个别。

根据前面的叙述已知，逻辑演绎的思维行程是从一般到个别，从理论到新的事实。个别是归宿、是目的。然而，它依赖于前提。没有前提，就无所谓演绎。尽管归纳的结果并不必然正确，但是它恰好有着这样的功能，即为演绎提供一般前提。假说并不一定是科学的，但它是以一般出现的。至于成熟的理论，就更具有一般性了。这就为从归纳过渡到演绎准备了必要条件。这正是归纳和演绎往往串连运用的原因。不少量子化学工作者就深有感触地认为，合成化学等实验性较强的化学分支为量子化学提供了经验材料；而量子化学反过来又为化学合成新的材料，如超导体材料、新药物以至于分子设计提供了理论前提。基于前者，可以认为，量子化学产生于实验化学；基于后者，可以展望，量子化学有着广阔的发展前途。

（2）从化学研究的复杂性看归纳与演绎的交叉运用。

化学研究的基本途径决定了归纳、演绎需要串连使用。化学研究的具体行程和具体对象往往是千差万别的。这种复杂的状况又使得归纳和演绎的关系复杂起来。归纳需要演绎作指导，以解决归纳研究的目的性、方向性和结果的正确性问题；演绎需要归纳提供前提。在演绎的指导下归纳，在归纳的基础上演绎，二者互相联系、互为前提。

人们对化学键的研究，似可认为经历了三个阶段：首先是道尔顿原子论提出到经典价键理论建立的原子论阶段；接着是从经典价键理论向现代化学键理论过渡的原子价的电子论阶段；最后是伦敦、海特勒将量子力学原理和方法应用于化学键研究的量子论阶段。一般说来，其中任何一阶段的理论都可看作是对前一阶段的归纳和演绎。现代化学键理论即量子化学理论就是这样。一方面表现在人们对原子价电子理论的总结归纳中，肯

定了原子与原子化合成分子时，需要结合力，而且这些力的形式不同；另一方面又表现在原子价的电子理论认定电子是原子结合的纽带，从这一前提出发进行逻辑演绎，找到了电子联系原子的具体形式。正是这种归纳、演绎成果的结合，才初步找到了分子静态、动态结构与性能间的关系，揭示了化学反应的规律。

在实际的化学研究中，不仅有归纳、演绎的串连和交叉运用，还有这二者和其它逻辑方法的并用和交替使用。

杨德才

5.化学假说及其作用

化学假说的形成和发展是人类思维形式和思维方法相结合的产物，在化学理论研究中起着重要的作用。化学假说既是化学理论形成的一种重要形式，又是化学研究的一种重要方法。从思维科学的意义上说，化学假说是人脑的一种创造能力，它是指导我们寻找具体化学科学真理的武器；化学假说在形成化学理论中起着突出作用。

化学假说的性质

所谓“假说”，就是根据已有知识，人们对于所研究的事物或现象作出初步的解释。它是人们关于某一事物或现象的原因还没有知道的时候所作的一种推测。这种推测是由前提（论断）和结论（推断）组成的。假说既是前提的一部分（至少是一个论断），又是未知的某些推理（至少是一个推断），由此可见它具有推理的性质。假说是推理的一种特殊形式，是推理的发展。它是由或然性推理（类比、归纳）过渡到必然性推理（演绎）的一种重要形式和方法。假说形成过程的逻辑形式，主要是通过类比或归纳推理来进行的；假说发展过程的逻辑形式，主要是通过演绎推理来进行的，假说验证过程的一般形式，主要是以实践证明为主，逻辑证明为辅。假说的思维形式，可以是逻辑的概念、范畴、判断、论判、推理、推断和证明，也可以是非逻辑的直觉、灵感、想象、移植、猜测和机遇等创造性的思维活动。因此，假说在某种意义上说，它是人类逻辑和非逻辑的思维形式和思维方法的最高表现。

科学的假说是建立在推理之上的，是为了解释或说明自然、社会、思维各方面的原因和规律而提出来的；也有为了解释某一个别事实而提出来的，还有为了帮助说明某一特殊问题或矛盾而提出来的，如果根据观察、实验的材料和逻辑的加工方法而提出关于某一类自然、社会、思维现象产生的原因和规律的初步推测，那就是科学假说。化学假说是科学假说之一种，它的定义是：以观察实验为事实根据，以思维形式为几何框架来反映物质的性质、组成、结构和变化规律的化学方法理论，叫做化学假说。

化学假说具有如下主要性质：

（1）化学假说具有科学性和科学体系性。任何科学都是以实践为基础，以事实为根据而产生的。任何科学都是一个范畴体系，它是由科学假说过渡到科学理论的形成与发展过程。例如，俄国化学家门捷列夫在1869年提出的化学元素周期表，就是以大量的实验事实作为科学根据的。最初这个表是以假说的形式出现，并对一些化学元素的性质作了预言，后来被实践证实了，从而发展成为化学元素周期律的系统理论，推动着各门La

化学的发展。这说明科学的假说是能正确反映客观世界发展规律的，是人类洞察自然的能力和智慧高度的表现。

（2）化学假说又具有推测性和论证性。化学假说的可推论性，是正确化学假说的一个重要标志。任何化学假说都是对未知的某种事物或现象产生的原因和规律的推论，因而有待实践的验证。正确的化学假说，不仅具有可推论或可推断性，而且能解释实验事实，预见将来，指导今后的实践。例如，德国化学家凯库勒在1865年提出苯分子（C_6H_6）具有六边形环状结构的假说，就是具有论断和推断性质的。如果化学假说不能推断，那么就不能在实践中验证，也不能对化学研究起指导作用，就应该放弃。

（3）化学假说一般还具有几何性和形象性。化学主要是在原子和分子水平上研究物质的性质、组成、结构和变化规律的一门科学。化学假说一定要反映出化学研究对象这一特征和物质的几何结构与性质、组成的关系。例如，1869年门捷列夫提出化学元素周期表和卢瑟福在1911年提出原子结构的行星模型，就是具有几何性和形象性的化学假说。由元素概念（点）到元素族（线）再到元素周期表（面），进而发展到原子结构的行星模型（体）。这就是由点、线、面、体构成的几何框架而组成的化学假说体系，其中充满着化学概念、范畴、判断、论判、推理、推断和证明。又如，凯库勒在1858年提出的有机化合物中碳原子为四价的假说和碳链假说，及在1865年提出苯分子为六边形环状结构的假说，都是具有几何性和形象性的特征。

化学假说的产生和演变

化学假说的产生和演变是一个复杂的思维过程，它的发展历程是：提出假说 ⟶ 形成模型（包括一组假说或一组推测）⟶ 推出判断 ⟶ 验证推断 ⟶ 或修正或推翻旧假说 ⟶ 再提出新假说（包括更多的预言或论断）⟶ 再形成模型（包括更多的假说或推测）⟶ 再推出新判断 ⟶ 再验证新推断……，如此循环往复，而每一循环都是向事物的本质接近一步，直至满足一定的需要，这就是化学假说形成和发展的规律。

实质上化学假说的产生和演变，主要包括三个阶段：提出假说；由假说推出结论（推论），验证结论（推断）。

化学假说形成和发展的基础在于实验事实；产生和发展的动力在于解决实验事实与旧理论的矛盾。化学假说作为一种思维形式，它是化学理论产生和演化的必要范畴。化学假说作为一种思维方法，它是化学理论发展和进步的阶梯，是构造化学理论的有力武器。

化学假说的形成和发展是思维形式和思维方法相结合的过程；目前，处在从宏观向微观、定性向定量、分子静态向分子动态、简单体系向复杂体系、原因性推理向规律性推理的发展过程中。化学假说推理的一般逻辑形式如下：

"A有属性a、b、c、d；B有属性a、b、c；所以，B可能有属性d"（类比）。

"A_1是B；A_2是B；A_3是B；……；A是B；A_1、A_2、A_3、……A_i是A类的部分对象；所以，所有的A可能是B"（归纳）。

"如果A是B（即假说成立），那么C是D（即结果存在）；C是D；所以，A是B"。

这种演绎推理形式，违反充分条件假言推理的规则："肯定后件存在，不能肯定前

件存在”，这个“A是B”的结论不能认为最后被证实，只是一种可能的原因，还可能有其它的原因。因此，应用另一种演绎推理：

“A是B_1；或是B_2；或是B_3（穷尽一切可能的原因），A不是B_2，也不是B_3（排除几种可能的原因）；所以，A是B_1（即为所求的原因）”（选言推理）。

苯分子的环状结构假说，就是应用这种逻辑形式和方法与非逻辑形式和方法相结合而推断出来的。

凯库勒有丰富的想象力，有一次他在书房中打瞌睡，梦见碳原子的长链象蛇一样盘绕卷曲，忽然蛇被激怒而咬着自已的尾巴尖，遂形成环状。他从梦中得到启发，“蛇”在凯库勒思维中起了“触媒”的作用，使他在探索苯分子结构中产生了新的联想和类比，打开了一条新的思路，导致了苯环假说的提出。我们如果把凯库勒当时的类比推理过程加以概括，那么可以引伸为这样一个类比推理来表示：“蛇有重量，能运动并能首尾相连而卷曲成环状；碳链也有重量，能运动；所以，碳链也能首尾相连而卷曲成环状”。可见，苯环假说的提出，具有非逻辑的直觉意义，但它还是有实验根据的。

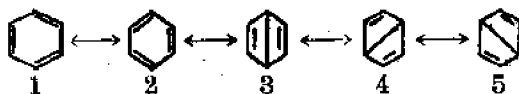
实验证明苯分子中有六个碳原子和六个氢原子，其中一个氢原子被其他原子或基团取代后，只能生成一种取代物。因此，苯分子中的六个氢原子所处的位置是一样的，都和六个碳原子相连结，故苯分子具有六边形的环状结构。进一步推论：

“氢分子有结构；氧分子有结构，水分子有结构，苯分子有结构，这些分子都具有结构；所以，一切分子都具有结构”。

“如果苯分子是六边形环状结构的话，那么氯苯有三种排列（邻位、对位、间位）的二元取代物；实验证明氯苯有三种排列的二元取代物，所以，苯分子是六边形环状结构”。凯库勒在建立苯分子是六边形环状结构假说时，还考虑到碳原子呈四价的情况，因此，他在苯环结构中又引入了双键的假说，并进一步推断：

“如果苯分子是六边形环状结构，并包含有三个双键的话；那么苯分子中六个碳原子是由交替的三个单键和三个双键而连结成的，使碳的四价得以保持；实验证明苯分子中六个碳原子不是由交替的三个单键和三个双键而连结成的；所以，苯分子是六边形环状结构并包含有三个双键不能确定”。为了解决这个矛盾，凯库勒又提出活动键假说，他又进一步推断：

“苯分子中的双键是绕着碳环振荡而不是固定的；或者绕着这个碳原子；或者绕着那个碳原子；实验证明既不是绕着这个碳原子，也不是绕着那个碳原子；所以，苯分子中的双键是绕着碳环振荡而不是固定的”。后来根据光谱实验证实，苯环是平面正六边形结构，相邻碳原子间键长距离相等，都是1.39Å（埃），介乎正常C＝C双键（1.33Å）和C－C单键（1.54Å）之间。因此，苯不具有一般烯烃的特性，比烯烃稳定得多，难进行加成反应，较易进行取代反应，故苯的邻位二元取代物没有异构体，同时也说明苯环中的碳碳键，既非单键，又非双键。这个推理导致了苯环中大π键或离域π键的发现，对现代化学结构理论有着深远的影响，使苯分子的两个凯库勒结构式演变成鲍林的共振结构式。即⬡或⬡式演变为⌬式。由于两个凯库勒结构共振的结果，因此苯分子结构可用一个正六边形（内划圆圈）来作形象的表示。曾经有人把苯的实际分子结构，看成是两个Kekule式和三个Dewar式的共振杂成物。



凯库勒结构（1和2）贡献大，而键角和键长变形较大的Dewar式结构（3、4、5）贡献小。也就是说，苯分子的正则式是1和2，用双箭头表示“共振”，把苯分子真实结构描述为两个更多正则式的双重平均叫“共振”，即波函数：

$\psi = C_A\psi_A + C_B\psi_B + \cdots\cdots$，

式中每个ψ代表这些结构式中的一个结构，ψ_A和ψ_B代表原子A和B的原子轨道的波函数，C_A和C_B代表权因子。从计算知道，随着试探波函数ψ的数学迭加项增加，计算所得的能量是降低的，因此把三个Dewar式作为次要的贡献来考虑，在解波动方程时，发现1和2同等分享获得的能值低于只考虑1或2的能值，若也考虑3、4、5，则能值更低，按这种方法计算，“1和2对实际分子贡献各占29%，其余三个（3、4、5）对实际分子贡献各占7.3%”[①]。美国化学家鲍林在1931年至1933年提出共振假说来解释苯分子的结构，同时还提出分子的杂化轨道假说来解释苯分子的价键结构。

苯环结构假说的形成和发展就是一连串的推理和验证推论的过程，它是化学假说提出、推论和验证的典型实例，在化学发展中是一个必然的阶段。因此，恩格斯说：“只要自然科学在思维着，它的发展形式就是假说。一个新的事实被观察到了，它使得过去用来说明和它同类的事实的方式不中用了。从这一瞬间起，就需要新的说明方式了——它最初仅仅以有限数量的事实和观察为基础。进一步的观察材料会使这些假说纯化，取消一些，修正一些，直到最后纯粹地构成定律。如果要等待构成定律的材料纯粹化起来，那末这就是在此以前要把运用思维的研究停下来，而定律也就永远不会出现”[②]。这段话是对假说的特有属性，历史地位和科学发展必然阶段的深刻说明或总结。这个结论对化学假说同样也是适用的。

化学家们借助于假说，就可以从观察实验中确立的事实，过渡到建立理论和创造发明。假说的论证是一个复杂的认识过程，也就是把或然性的知识最终转化为可靠的或必然性的知识的整个过程，其中既包含有相对真理的成分，又包含有绝对真理的颗粒。假说转变为正确的理论，总是相对真理和绝对真理的辩证统一；也是或然性推理和必然性推理的辩证发展过程，它在化学理论形成和发展中起着巨大的作用。

化学假说在化学理论形成和发展中的作用

化学假说的真理性，在于主观符合客观，并在主观与客观相互作用中得到反复的验证。正确的化学假说能经得起实践的多次检验，随着实践的发展而发展，在一定条件下逐步转化为可靠的知识，形成真正的化学理论，推动着化学科学的向前发展，如苯环假说。错误的化学假说虽然在实践中验证失败，但是从化学发展史上来看仍起过一定的作用，如燃素假说。化学假说转变为化学理论，不是靠个别的化学假说所能达到的，而是靠一系列的化学假说点（概念、范畴）、线（判断、论判或定律、规律）、面（推理、

---

① 〔美〕J.马奇：《高等有机化学》，人民出版社，1981年，24页。
② 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，218页。

证明或原则、原理）组成的几何框架结构才能实现。

那么化学假说在化学理论形成和发展中有哪些作用呢？

（1）化学假说的特性可以转化为化学理论的特性，具有形成和发展化学理论的作用。

化学假说具有科学性和系统性，说明它本身就是一个科学系统，可以转化成化学理论的范畴体系。任何科学理论都是一个范畴体系，这是科学理论重要特性之一。科学理论中包含有明确的概念，恰当的判断，正确的推理，严密的论证，故能正确反映客观真理，指导实践，使人们不仅能认识世界，而且能改造世界。化学假说既是一个历史发展的过程，它与历史研究方法发生联系，又是一串思维形式，它与逻辑研究方法发生联系。化学理论体系的建立，都是以化学假说作为实践和理论之间的中心环节而建立起来的。

化学假说具有推测性和论证性，说明它在形成化学理论时，既是一个论断的证明形式系统，又是一种论断的证明方法体系。任何一门科学理论，都能提供人们研究对象的形式和认识对象的方法，这也是科学理论重要特性之一。作为证明的形式系统：化学假说在形成化学理论时，是由一系列的概念、判断、推理和证明等思维形式所组成的逻辑体系或知识体系。它表现为一系列概念的形成（如原子、分子）和规律（如元素周期律）的发现，而这些概念和规律又近似地把握着永恒运动和发展的自然界。作为证明的方法体系：化学假说在形成化学理论时，是由一系列的观察、实验、比较、分类、类比、归纳、演绎、分析、综合、抽象、具体、历史的和逻辑的等思维方法所组成的方法体系。如果把化学假说作为方法体系来应用，那么它就能把思维形式构成的化学假说的几何框架转变成化学理论的大厦。

化学假说一般具有几何性和形象性，说明它本身在形成理论时，就是一个反映化学物质的性质、组成和结构的几何体系。化学物质的几何结构与化学物质的性质和组成有着密切的关系。从原子和分子的性质和组成可以推出原子、分子的几何结构。反之，从原子、分子的几何结构又可以帮助我们认识化学物质的性质和组成。任何科学理论都能不同程度地反映客观世界的面貌、预见未来，指导实践，这也是科学理论重要特性之一。提出化学假说仅是一种手段而不是目的，只有将化学假说转变成化学理论才是目的，化学发展史证明，这个目的能够达到。

（2）化学假说的形式和方法可以转化为化学理论的形式和方法，并具有从事物运动和发展中去反映和把握化学研究对象的作用。

从化学发展史上来看，化学假说是一个不断证实和证伪的过程，也是化学假说的形式和方法不断更新的过程。化学假说是一个发展着的概念、范畴体系，它的更新也就是概念、范畴的更变，每次更新或变更都是人们对化学研究对象深入一步的认识，同时化学理论也就向前发展了。化学假说的发展既有继承性又有革命性。一方面化学假说形成化学理论是从经验事实中引伸出来的知识体系或范畴体系，这些体系是用经验来证实的命题集合，这种得到证实的命题集合不断累积和继承的历史，就是化学理论发展的历史。另一方面化学假说形成化学理论，是一个矛盾运动发展的过程，它的发展动力是新事实、新问题与旧理论的矛盾，因此，是一个不断革命的过程，这种化学假说不断革命或不断变更的历史，就是化学理论发展的历史。化学理论的发展，就是化学假说发展的继承性和革命性的辩证统一。化学假说的形式和方法是多种多样的，例如，人们对热现

象的本质研究有几种假说：有的人认为热是一种元素或燃素；有的人认为热是一种物质；有的人认为热是一种运动。又如，人们对原子的本质认识有几种假说：古希腊哲学家德谟克利特认为，万物是由原子组成的，客观世界只是原子和虚空。英国化学家道尔顿认为，化学元素由非常微小的，不可再分的物质粒子——原子组成的，原子在所有化学变化中保持自己的独特性质。卢瑟福认为，α粒子的散射实验证明原子有核存在，从而提出原子结构的行星模型。这些假说是从各个角度去反映和把握化学的研究对象，对化学理论体系的发展起着重要的作用。

总之，化学假说在化学理论形成和发展中的作用，可以是单一的或分析的假说，也可以是综合的或合成的假说。

化学假说既可以走概念化的道路，又可以走范畴化的道路。每一门化学都是化学概念的总集成，都是各种化学概念组成的几何框架。化学范畴体系的建立，也就是化学假说系统过渡到化学理论系统的形成与发展过程。如果说，化学假说系统化的道路是人们对未知领域进行推测性探索的道路，那么，化学理论范畴化的道路，就是人们对未知领域有目的、有方向、有指导地进行本质性探索的道路。由此可见，化学理论范畴化的道路，是化学假说发展的方向。它既是指导我们寻找具体真理的道路，又是指导我们进行化学研究的总形式和总方法，这就是化学假说在化学理论形成和发展中的突出作用。

傅 寿 宗

6. 化学中的模型方法

在自然科学研究中，人们往往根据实验中的观测事实和已经得到验证的科学原理，对研究对象的结构、性能和运动规律进行理论分析，先设想出其大致的框架，即提出研究对象的模型。然后，以此作为基础再进行推理或计算，对研究对象作出解释和预测，并在同实验资料的对照中加以检验、修正和完善，形成有关这类对象的概念与规律的知识体系即科学理论。——这就是通常所说的模型方法。

模型方法同样是化学研究中广泛采用的方法。以下试从剖析分子模型着手，说明这个方法在化学中的一些特点，须指出，由于学科间的相互渗透，由于化学包括了各种各样的分支，这些特点可能存在例外。

化学中模型方法的一般特点

十九世纪初，随着道尔顿的原子论的出现而开始了“化学中的新时代”[①]，逐步形成了关于物质构造的三个层次的观念，即原子——分子——宏观物体。在这里，分子的结构、性质和相互转化被推到首要地位，并成为化学的主要研究对象。于是，分子模型便成了化学研究中最基本和最普遍出现的模型。人们一般不能直接“看”到分子，需要利用一定的模型来把握它们的结构、性能和变化规律。化学把分子当作研究的对象，一定的分子模型总是和一定化学理论的整个结构联系在一起的，而且它们的建立和发展也与之密切相关。这样，化学中的分子模型一般不是表现为简化模型，而是表现为“理论

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，269页。

模型”，即化学中的分子模型的演变代表了化学理论的不同发展阶段。分子模型在化学学科中的特殊地位，反映了化学研究方法的特殊性。

物理学家也常常谈论分子。例如气体分子运动论，但在物理学家的思想框架中，分子作为气体物质系统中的要素，一般被看做微小的弹性球体，这种理想气体的分子模型与化学家的分子模型是有区别的。又例如，物理学家常常用分子电流来解释物质的磁性；这时，他们讨论的仅仅是物质的磁性，各种物质的分子的差别仅在于分子电流的大小和方向，这和化学家的分子模型也是大相径庭的。物理学家研究物质运动最纯粹、最基本的形式，因而能够对研究对象作高度的抽象和简化。在所研究的问题范围内，他们的分子模型较多表现为在质上同一的微粒。而化学家研究的是千千万万在质上不同的分子；研究它们的具体性质和相互转化。因此，化学家的分子模型对于化学家的思考来说，需要反映出它们在质上的千差万别，具体显示它们的组成、结构和性能。正是由于这个原因，物理学家的分子模型在形式上常常表现为象形的（如表示为一个球体），而化学家的分子模型常常表现为符号模型（如经典结构式）。而这种符号模型的应用，又形成了化学家讨论分子性能和变化的一套特有的直观化方法。诚然，物理学家在考虑分子的转动、振动时也采用与化学家相仿的模型。

需要指出，化学家所研究的分子尽管千差万别，但都是由有限种类的原子构成的。这表明它们在结构上具有很大的共性，因而能够以一个统一的法则（如以原子价规律来书写经典结构式）用符号模型来描述。生物学家和地质学家很少有这样统一的法则来表示他们的模型，这是因为他们的研究对象更为复杂多样。总之，化学中模型方法的特点首先是由化学研究对象的特殊性决定的。

经典结构式从化学方面反映了分子的本质属性

经典化学中至今仍被广泛采用的分子模型是经典结构式。它出现之后，立即成为一个有力的思维工具，促进了化学理论和化学实验工作的发展。日本化学家细矢治夫和丸山有成曾经认为，经典的化学理论是以化学结构式这种模型为中心发展起来的①。虽然这是偏高的评价，但也不是毫无道理的。

经典结构式属于符号模型，有两类符号：一是用拉丁字母表示的化学元素符号，每个元素符号代表分子中该元素的一个原子，利用这种符号表示分子中所含原子的种类和数量；二是用短线表示的价键符号，利用它们表示分子中原子相互结合的次序和性质。

利用上述符号书写的经典结构式，反映了分子的化学结构。但这决不是说，经典结构式就是分子的客观实在；作为思想模型，它是在经典化学的认识水平上人们关于分子结构的理性观念的直观表示。这种观念主要有：原子是构成分子系统的要素；每种化学元素的原子都有一定的原子价；相邻原子间各出一个原子价单位形成一个化学键单位；所有的原子价都被互相饱和，即都被用于成键；分子中的原子通过化学键按照一定次序相互联接。但是，原子价、化学键作为一种科学概念，并不是真实分子结构的简单模写，而是对分子中的原子相互作用这一客观实在的科学抽象。所以，经典结构式是科学抽象的产物，是对分子本质属性的相对正确的反映。

---

① 〔日〕细矢治夫、丸山有成：《结构与物性》，上海科学技术出版社，1979年。

正由于经典结构式和真实的分子客体之间有着这样的反映关系，人们才能把前者（模型）当作后者（原型）的替代者来加以研究，以获取关于原型的新的知识。例如，推究异构体的数目，分析分子中原子之间的相互影响，预测分子的重建方式，或它和其它分子发生化学反应时的可能产物等。

从1811年阿佛加德罗提出分子假说算起，化学家们概括了大量的实验资料，作了多方面的理论探索，经过近半个世纪的努力，终于抽象出原子价和化学键这样的科学概念，并初步掌握了原子价的规律。在这个基础上才诞生了经典结构式。在这期间，曾出现过许多其它的分子模型，但都被淘汰了。例如，日拉尔类型式，从这种模型很少能推究出原型新的信息，缺乏预测功能，而主要是对化学现象的事后解释。其原因在于它的形式化缺点，没有反映出分子结构的本质属性。而经典结构式则是从化学方面反映分子的本质属性，它的抽象方式受制于化学研究的对象和任务。——经典结构式的这一特点也可以说是化学中模型方法的特点。

经 典 结 构 式 的 发 展

经典结构式的发展主要有以下几个方面：

（1）立体化学。化学家们认识到，原子价不仅有数量的特性，而且还有方向性。这样，经典结构式从表示分子中价键的联接次序发展到表示分子中价键的空间分布以反映分子的空间构象；从描述分子中原子价的相互饱和发展到对分子中原子间相互作用的力能的具体分析。

（2）配价理论。十九世纪末，维尔纳提出主价和副价概念，把经典结构式推广到表示无机化合物中的络合物。

（3）对共轭分子的描述。化学家们发现整数性的原子价不能确切描述共轭分子的结构和性能。这样，先后出现了凯库勒的苯分子振动键模型，梯尔的系价模型等。

（4）路易斯电子式。路易斯用共享电子对代替经典结构式中的短线，从而深入到电子层次来描述分子的化学结构。这样，使化学图像反映一些电的性质并具有潜在的流动性，有利于考察分子的反应性能。

人们总是在特定的具体条件下认识现象并掌握它的一定层次（或方面）的本质。随着人们所掌握的实验资料的增多和关于物质运动规律认识的深化（例如发现了新的科学原理），人们对研究对象本质属性的认识是不断发展的，因而关于这个对象的模型也要不断发展；模型是在运用当中被发展的，即发现新的实验事实不能用旧模型来描述时，这时就出现对旧模型的修订或提出新模型；新模型的出现，无论是形式和内容上都会继承旧模型的合理因素。对于模型的发展来说，上述这些对于各个学科都是共同的。但是，从经典结构式的发展来看有一点是值得注意的：除了模型所反映的本质属性增添新的内容（例如，表示价键的空间分布和力能）这样的横向发展与所反映的本质属性的深化（即深入到电子层次）这样的纵向发展之外，还出现另一种发展方式，即分化出不同种类的模型：对络合物是一类模型，对共轭分子又采用另一类模型。这一点也可以看作化学中模型方法的一个特点，因为它的逻辑根据还是在于化学研究对象的特殊性。

对于原来的经典结构式分子模型来说，络合分子、共轭分子是个“例外”情况。出现了“例外”，意味着被“证伪”；然而，与物理学的情况不同，这种“证伪”并不意

味着原来模型的被推翻，而是出现新的模型类型来作为对原来模型的补充。

量子化学中的分子模型

与经典结构式相比较，量子化学中的分子模型有以下两点不同之处：

（1）量子化学的分子模型是从电子运动的本性上来描述分子的结构和性能。这样，所要解决的科学问题进一步深化和复杂化了。模型作为假设性的描述，对于经典结构式来说主要用之于归纳实验资料、总结经验性的化学规律，即采取假设——归纳方法；而对于量子化学的分子模型却主要用之于演绎、作为建立计算方案或定性讨论的工具，即采用假设——演绎方法。量子化学的分子模型还有一功能：由于理论的抽象性越来越大，远离了人们的日常经验，使之在理解和掌握它时都会遇到困难，因而一定程度上降低了理论的应用效能；但量子化学的分子模型又是把抽象的量子力学理论和人们的日常经验联系起来的一座桥梁。这反映了分子中电子运动本质属性同时又是以直观图像显示出来的量子化学分子模型能使之得到的一种补偿。

（2）实验中观测到的现象和量子化学分子模型所要反映的本质属性之间有更多的中间环节。这样，模型的建立更加依赖于作为未来模型的出发点——基本假定的选择。分子轨道理论的模型是从单电子近似出发，而价键理论的模型则从电子自旋配对出发。对同一对象出现不同的模型，它们长时期地并存和争论，这种状况促进了模型的发展。

如果将上述两类模型和物理学中的分子模型或原子模型一起来比较，就可以看到经典结构式和量子化学分子模型的共同点，从而表明它们与物理学中的模型存在着如下的差别：

（1）量子化学的分子模型同样要反映分子的化学组成和化学结构，反映出化学研究对象质的多样性和具体性。可以认为，在量子化学的模型中，迄今还不能把分子系统简单地看作仅仅是电子和原子核构成的系统；无论是价键理论还是分子轨道理论，“价键”以及“分子中的原子”等仍然是些很有用的概念。

（2）不仅是价键理论，而且分子轨道理论的模型也往往表现出对经典结构式这种分子模型的继承关系：在HMO方法中，由原子实和σ电子构成的分子骨架要借助经典结构式来标示的；分子轨道理论中标示键级、自由价、电荷数的分子图也要借助经典结构式，各种各样的定域分子轨道模型和经典结构式一样，都是对分子的定域键描述。

化学中的模型和物理学原理

作为科学的抽象，化学中的模型的建立和发展既依赖于对实验事实的概括，又依赖于已经得到验证的科学原理的指导。其中当然也包括了物理学原理。例如经典化学中拜耳的张力环分子模型，用机械的张力来解释碳环形化合物的稳定性；而在现代的量子化学中，则直接依靠量子力学原理来建立分子模型。但是，在化学史上却有较多模型不是物理学原理所能解释的，有的甚至是与之相矛盾的。例如，路易斯电子式中的电子是静止的，即使是当时的物理学家也不认为分子中的电子可以是静止不动的。然而，路易斯电子式却是一个非常有用的分子模型。对此，著名的英国化学家巴特莱特（Bartlet）曾发表评论指出，路易斯有着特殊的见解和大胆的主张，把物理学家的电子放慢至某种程度，以致有机化学家敢于将它们置于自己的宏观理解下。这些理解引向二十世纪早期鲁

滨逊、因果尔德和与他们同时代的工作者得出了伟大的概念。

在这里，就产生了一个如何评价化学模型的合理性问题。物理学原理无疑是一个有用的尺度，但如果把它当作唯一的或者是最重要的尺度，那么正如路易斯电子式的例子所表明的，难免要得出错误的结论。

（1）模型在它提出的时候具有假说的性质，不是既有原理的科学推论。一个化学模型的合理性应该通过它的运用来加以考察；如果它能成功地解释和预测实验事实，那么这个模型就有它的合理性；如果这种解释和预测失败了或者不满意，那么即使它不违背既有的物理学原理，也表明它需要修改和发展。实验事实是建立和评价化学模型的真正基础。

（2）自从自然科学分化出物理学和化学的门类，人们开始分门别类的研究活动之后，这两大学科的发展就显示出相对的独立性，它们的模型及理论的发展各有自己独特的传统和逻辑。因此，化学模型中包含的概念和物理学原理之间出现不一致的情况是很自然的。诚然，物质世界是统一的，人们对它的认识也应该是统一的。而物理学和化学的相互渗透和它们本身的发展，正加速地推动人们向这个方向前进。

熊 汉 镨

7. 理想化方法在化学中的若干应用

理想模型和理想实验（或称思想实验），是自然科学研究中两种重要的研究方法。它们有一个共同的特点：在研究中突出对象的主要矛盾或主要特征，忽略掉它的其它矛盾或特征。在设计思想实验时，常需应用理想模型。而思想实验本身也可理解为一种思想模型，是有假想观测者干预的关于客体的动态模型①。因此，常把这两种方法合称为理想化方法。这两种方法在化学（特别是物理化学）研究和教学中都有重要作用。

理 想 模 型

模型方法中所用的模型包括物质模型和思想模型两大类。思想模型可以理解为与原型（客观对象）的关系满足下列条件的概念的系统②：第一，它以某种形象化的形式反映，再现原型的某些重要性质和关系（原型常有很多特征，本质特征和非本质特征交织在一起，它只反映原型的一部分特征），是原型的简化和纯化了的摹写，所以是原型的抽象和近似；第二，在科学研究中，它在被指定的意义下代替原型，使我们对原型的研究比较容易；第三，研究它还能提供关于原型的新信息。在对于各种宏观客体和微观客体的研究中，都广泛地应用思想模型。

理想模型是一种思想模型，它是以高度简化和纯化的即理想化的形态再现原型的某些特征的思想模型。它突出地再现、反映原型的主要矛盾或主要特征，而完全忽略了它的其它矛盾或特征。理想模型主要用于对宏观客体的研究。例如，物理学中的质点、点

---

① 高文武，“简论思想实验”，《自然辩证法通讯》1982年第5期。

② Г.И.鲁查文：《数学模型的实质》，《科学与哲学》丛刊1983年第2期；高达声：“略论模型法”，《哲学研究》1981年第7期。

电荷、理想气体、理想刚体、理想流体等都是理想模型。

研究许多化学问题，也要应用理想模型。结晶化学中的理想晶体是指在三维空间按点阵式的周期性无限伸展的晶体。这就是一个理想模型，它突出地反映了晶体内部的有规则的空间点阵式结构，而完全忽略了实际晶体体积的有限性、晶体内粒子的运动以及各种晶体缺陷等复杂性质。理想晶体模型是研究一切实际晶体的结构和性质的基础。例如，若不以理想晶体模型为基础，就无法研究各种离子化合物的晶体结构，也无法研究形形色色的晶体缺陷和晶体生长的规律。在化学热力学中，理想模型有十分重要的作用。孤立体系、理想气体、理想溶液、绝热过程、热力学可逆过程等等都是理想模型。理想气体模型完全忽略了气体分子的体积和分子间作用力，突出地反映气体分子的热运动这一性质。理想溶液模型完全忽略了溶液的不同组分混合时的热效应和体积变化，也就是完全忽略了同名分子间作用力与异名分子间作用力的区别，突出地反映了浓度变化对溶液性质的影响。热力学可逆过程是热力学过程的理想模型，它突出地反映了过程中热力学系统的状态变化，完全忽略了实际过程中不可避免地存在的摩擦阻滞作用，也完全忽略了进行实际过程时必须存在的体系和环境之间某些强度性质的差值（如压力差、温度差等），从而也忽略了过程进行的速度等性质。在化学中还有其它一些重要的思想模型，如电解质溶液理论中关于弱电解质的阿累尼乌斯部分电离模型，关于强电解质的德拜—休格尔离子雾模型；化学动力学中的活化络合物模型等。其中有些也是理想模型。

与在物理学等其它学科中一样，在化学中建立和应用理想模型有着十分重要的意义。

（1）建立理想模型可以使研究工作大为简化，从而使我们比较容易地发现事物（原型）的近似规律。在自然界中有一些实际事物与理想模型接近，在一定条件下可近似地将研究理想模型得到的规律直接用于这些实际事物而不会发生大的偏差。例如，从分子运动论的观点来考察，气体的主要矛盾是气体分子间作用力和气体分子热运动的矛盾。但在通常温度、压力范围内，尤其是在高温低压的条件下，可以直接应用理想气体状态方程式进行计算，不会发生大的偏差，因为这时分子热运动不仅是矛盾的主要方面，而且其作用远远超过分子间力的作用。又如，研究理想溶液模型得到的规律，对于某些二组分溶液，如光学异构体的混合物、立体异构体的混合物、紧邻同系物的混合物以及同位素化合物的混合物等，都可近似地适用而无大的偏差。

（2）建立理想模型为研究实际事物（原型）提供了一个比较的标准，从而开辟了研究实际事物的特征和变化规律的途径。对于复杂的事物，可以先研究其理想模型，然后将所得结果加以适当的修正，就可得出此事物的某些特征或近似规律。这是化学热力学中广泛采用的一种重要方法。例如，将理想气体状态方程式加以适当修正，即可得到比较符合实际气体行为的范德瓦尔斯方程式或其它物态方程。这实际上是用气体的较复杂的思想模型（如范德瓦尔斯气体模型）代替理想气体模型。另一种修正的方法，是对于从理想模型得到的数学式引入修正系数，使公式适用于实际对象，而修正系数的数值由实验确定。例如，在理想气体状态方程式中引入压缩因子Z，使方程式$PV = ZnRT$适用于实际气体，就是采用的这种修正方法。又如，将理想气体的和理想溶液的化学势公式中的分压和浓度，分别改为逸度和活度，也就是分别引入逸度系数和活度系数这两个修正系数，使这些公式适用于实际体系，也是采用的这种修正方法。在化学热力学中尤

为重要的是用可逆过程这个理想模型作为研究实际热力学过程（不可逆过程）的标准。由于在可逆过程中某些过程属性（如热温商之和、等温条件下的功等）变为只由始、终态决定的双态属性，从而与某些状态函数改变值（如ΔS、ΔF、ΔG等）直接联系起来，于是就解决了求算实际过程中这些状态函数改变值的问题。

（3）以理想模型为演绎推理的基础，将普遍原理和逻辑方法用于模型，可以推论出许多在理论上或实践上有重要意义的结论，形成系统的理论或作出科学的预见。例如，将热力学第二定律这一普遍原理用于卡诺可逆循环过程，利用可逆过程这一理想模型所具有的二向重演性，即演绎出卡诺定理，然后再通过演绎和分析（其中又用了可逆过程和不可逆过程的特性），终于发现了熵函数，导出了克劳修斯不等式。将热力学定律用于气体、溶液等各种体系的理想模型，可演绎出许多结论、公式，它们是构成化学热力学理论体系的重要组成部分。又如，将量子力学原理用于理想晶体，演绎得到的结果指明了大大提高固体材料强度的途径。

（4）在思想实验中常需应用理想模型，由此可得出许多重要的结论。

总之，“模型对沟通科学现象和本质的认识过程，起到了重要的桥梁作用。同时，它给人以简单、清晰的物理图像，直观明确的物理含义，因而使这种模型方法被广为采用。”① 理想模型作为思想模型的一种，其作用和特点也是如此。

“思 想 实 验”

“思想实验”，常常又称为理想实验或假想实验，也是在科学史(特别是物理学史)上曾起过重要作用的一种研究方法。它的意义和作用，可以用伽里略理想斜面实验和卡诺理想循环这两个著名的“思想实验”来说明。（为免误解，我们开头对“思想实验”一词加用了引号。）

伽里略注意到，当一个球从一个斜面上滚下然后滚上第二个斜面时，它在第二个斜面上所达到的高度略低于它在第一个斜面上开始滚下时的高度。这一微小差别与球和斜面之间的摩擦有关，如摩擦越小，则这个差别就越小。由此伽里略推断，如果完全无摩擦，则上述两个高度将恰好相等。他又注意到，如果第二个斜面的斜度越小，为了达到同一高度球在它上面滚过的距离就越长。然后他推断，如果完全无摩擦，而且第二个斜面的斜度为零的无限长的水平面，则球从第一个斜面滚下来以后将在此水平面上永远不停地运动下去。这是一个思想实验，伽里略借助于这个思想实验，得到了作为经典力学基础之一的惯性原理，使力学从陈旧观念的长期束缚下解放出来。

对于物理化学来说，热力学中的卡诺循环是最重要的思想实验之一。卡诺循环是工作物质经过下列四步状态变化所组成的热力学循环过程：（1）从始态出发，在与温度为T_2的热源作热接触时进行可逆等温膨胀，从热源吸收热量Q_2（正值）；（2）可逆绝热膨胀，膨胀后工作物质的温度变到T_1，$T_1<T_2$；（3）在与温度为T_1的热源作热接触时进行可逆等温压缩，从热源吸收热量Q_1（负值）；（4）可逆绝热压缩，压缩后工作物质的温度升到T_2，并且其状态恢复到始态。显然，在这个循环中略去了一系列次要因素：设想热源的热容量非常大，从而略去了工作物质在步骤（1）和（3）中

① 卢嘉锡：“结构化学研究中若干辩证法问题”，中国自然辩证法研究会首届年会学术论文集，1981年。本书已收入这篇论文，请参阅。

的温度变化；对于步骤（2）和（4），略去了工作物质和外界的热量交换；四个步骤全都是可逆的，这就意味着对每一步骤都略去了摩擦等不可逆因素；实际热机中循环终了时一部分工作物质被抛弃掉，这也被忽略了；设想全部过程是封闭的循环。所以卡诺循环是一个实际上不能实现的理想循环，它实质上是一个思想实验。但是，卡诺循环有非常重要的意义，因为它使热机内部的基本过程以纯粹的形式显露出来了。正如恩格斯所指出的，卡诺"撇开了这些对主要过程无关重要的次要情况而设计了一部理想的蒸气机……，它表现纯粹的、独立的、真正的过程。"①由卡诺循环可得出：这种理想热机的效率$\eta=\frac{T_2-T_1}{T_2}$，它只与两个热源的温度有关，以及$\frac{Q_2}{T_2}+\frac{Q_1}{T_1}=0$。借助于这些重要结论，并根据永动机不可能，卡诺发现了著名的卡诺定理。在此基础上，克劳修斯等发现了热力学第二定律和熵函数②。

在物理学史上还有其他许多重要的思想实验。在电磁学中，思想实验对于建立麦克斯韦方程曾起了重要作用。在量子论中，海森堡借助于电子束单缝衍射的思想实验建立了测不准关系。尤其是在建立狭义相对论和广义相对论的过程中，爱因斯坦几乎在一切论证的关键环节都借助于思想实验。可见，在科学史上，思想实验确实是一种光彩夺目的重要的研究方法。

关于思想实验的特点和本质，近年来国内有不少论文和著作曾加以讨论，认识不完全一致。具有代表性的意见主要有以下两种。

一种意见认为：真实的科学实验是一种实践活动，而思想实验则是一种思维活动，它是人们在思想中塑造的理想过程，是一种逻辑推理的思维过程和理论研究的重要方法。理想实验是以真实的科学实验为基础，以一定逻辑法则为根据，抓住过程的主要矛盾，忽略其次要矛盾，对实际过程深入进行抽象分析的思维活动③。或者说，思想实验是一种按照实验的格式展开的理性思维活动④。有的作者断言：思想实验是由人们在抽象思维中设想出来，而在任何时候都不能实现的⑤。

另一种意见认为：思想实验可看作思想和实验两个方面的统一，它的实验特征表明它是一种形式的科学实验，它的思想标志使它具有与实际实验不同的特殊的本质特点。因此，思想实验固有实践本性，不能把思想实验归结为一种逻辑推理的思维过程，不能把它归结为一种理论思维形式。关于思想实验具有实践本性，主要有如下理由：（1）思想实验超出概念或逻辑的范围而力求与自然界（或现实存在）相联系，它需要与自然界实际相关的和经验性的条件，虽然这些条件是"在内心中设想出的潜在的实验条件"；（2）思想实验与实际实验有重要的共同性；（3）思想实验在一定条件下可成为实际实验的先导；（4）思想实验在颇大程度上可代替实际实验而起作用（虽然不能完全代替）；（5）思想实验和实际实验在历史传统上本是同一家族，许多科学史家都一致认为思想实验是一种实验形式，他们都不把思想实验排除在实验传统之外。在一些科学家和科学哲学家看来，思想实验是一种类型的科学实验，这个命题得到了自然科学

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，207页。
② 傅献彩、陈瑞华：《物理化学（1979年修订本）》上册，110—114、158—163页。
③ 《自然辩证法讲义》（初稿），人民教育出版社，1979年，285页。
④ 陈衡：《科学研究的方法论》，科学出版社，1982年，282页。
⑤ 高文武："简论思想实验"，《自然辩证法通讯》1982年第5期。

（主要是物理学）历史和现状的有力的支持①、②。

我们认为，关于思想实验的特性和本质，尤其是它与科学实验以至与实践的关系，需要继续深入地加以研究和讨论，而上述第二种意见是很值得重视的。

是不是所有的思想实验都不能物化为实际实验呢？不是。有些思想实验确实根本不可能实际发生，如伽里略理想斜面实验、卡诺理想循环等皆如此，因为完全没有摩擦、绝对绝热等条件实际上是做不到的。另一些思想实验则不同，尽管过去从未实际做过，当时限于科学技术发展水平，不能在实际上实现，但它们可以成为实际实验的先导。随着科学技术的发展，后来它们能够物化为实际实验。例如，1938年爱因斯坦和英费尔德在《物理学的进化》一书中，对于单电子衍射实验写道："这是一个理想实验，它事实上不可能实现，不过很容易想象而已。"但在1949年，苏联法布里康等在一个实际实验中观察到单电子的衍射。为此，1960年英费尔德在该书新版序中特地作了更正③。另有不少思想实验也是如此④。

随着自然科学的发展，物理学的方法逐渐向其他学科移植和渗透。思想实验作为一种研究方法和阐明科学理论的表述方法，也从物理学推广应用于化学、生物学等其他学科。在化学中，思想实验主要应用于与物理学理论关系最密切的分支学科物理化学，常见的有以下几种类型：

（1）用理想活塞筒（活塞无重量，活塞与筒壁之间无摩擦）进行的思想实验，"实验"的对象（体系）装在筒中，而在环境中有热源和功池。例如，气体绝热可逆膨胀的思想实验（筒壁绝热）；气体等温可逆膨胀的思想实验⑤。在理想活塞筒（筒壁可传热）中装有气体，放在无限大的热源上使气体在膨胀时保持温度不变，设想气体每一步膨胀时作用于活塞上的外压比气体本身的压力都小无限小量，则这样的膨胀过程是一个可逆过程。借助于这个思想实验可得到一个重要结论：气体在可逆膨胀过程中作的功最大。

这里再谈谈关于弯曲液面下附加压力的思想实验。将理想活塞筒竖放，筒壁连一毛细管，如图4.1所示。装在筒内的具有水平液面的大量液体通过毛细管与位于管端的小液滴相连接，大液面承受外界通过活塞施加的压力。当大量液体与小液滴压力平衡时，使活塞向下移动一无限小距离，通过计算此过程中体系净得的功，可导出公式$\Delta p=2\gamma/r$。式中Δp为小液滴所受其弯曲液面施加的附加压力，r为小液滴的半径，γ为液体的表面张力。此公式在表面化学中很有用⑥。

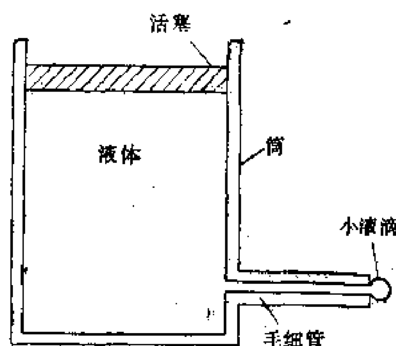


图4.1 弯曲液面下附加压力的思想实验

---

① 舒炜光："思想实验固有实践本性"，《社会科学战线》1982年第4期。
② 托马斯·S·库恩："思想实验的作用"，见库恩著、纪树立等译《必要的张力》，1981年，237—263页。
③ 《物理学的进化》，上海科学技术出版社，1962年，2页。
④ 参见杨旭："思想实验在自然科学研究中的作用"，《四川大学学报》1981年第3期。
⑤ 傅献彩等：《物理化学（1979年修订本）》上册，93—98页。
⑥ 印永嘉等：《物理化学简明教程》下册，1980年，100页。

（2）用卡诺热机进行的思想实验。卡诺热机的主要装置仍是理想活塞筒，不过其中进行的是卡诺循环这样一种特殊的理想过程，比上述第一类思想实验较为复杂。除卡诺循环本身外，在物理化学中属于这一类的思想实验还有证明卡诺定理所用的思想实验；证明热力学第二定律的克劳修斯说法和开尔文说法等效应所用的思想实验等[①]。卡诺定理的证明如下：如图4.2所示，设在两个热源之间有可逆热机（即卡诺热机）R和任意热机I在工作。调节两机使在一循环中所作的功相等，都为W。这时R和I分别从高温热源吸热Q_1和Q_1'，分别向低温热源放热(Q_1-W)和$(Q_1'-W)$，其热机效率各为$\eta_R=W/Q_1$和$\eta_I=W/Q_1'$。今若以I带动R逆向转动，可得出在一循环中总的变化只是热量(Q_1-Q_1')从低温热源传到高温热源而未发生其它变化。如$\eta_I>\eta_R$，必有$Q_1>Q_1'$，即违反热力学第二定律。因此，只可能有$\eta_I\leqslant\eta_R$，这就证明了卡诺定理。

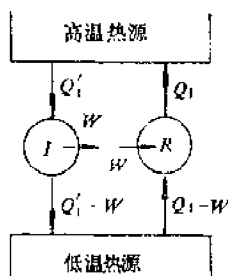


图4.2　用卡诺热机证明卡诺定理的思想实验

（3）用带有固定的或可移动的半透膜的容器进行的思想实验。如果把理想活塞筒中的活塞改为半透性的活塞，所做的思想实验就属于这一类。这类思想实验常用于研究溶液（包括气态混合物）的性质和变化过程。例如：关于范霍夫渗透压定律的思想实验[②]；用范霍夫平衡箱研究理想气体混合过程的思想实验，由此可得出混合时的熵变和自由能变化的公式[③]；用范霍夫平衡箱研究气相化学反应的思想实验，由此可得出反应等温方程式$\Delta G=-RT\ln Kp+RT\ln Qp$[④]；用带半透膜的容器研究气体分子动能与温度的关系的思想实验等[⑤]。

用范霍夫平衡箱研究气相化学反应，可用合成氨反应为例加以说明。如图4.3所示，设一容器A内含有N_2、H_2、NH_3三种气体，它们都处在一定的温度，分压分别为P_{N_2}、P_{H_2}、P_{NH_3}。由于各分压是任意指定值，一般反应未达化学平衡。要计算此反应的自由能变化ΔG，必须设计一个可逆过程。如果反应在该温度下达平衡时各气体的分压分别为P_{N_2}'、P_{H_2}'、P_{NH_3}'，把这种达到化学平衡的反应体系置入范霍夫平衡箱B内。箱B连三个通道，各经过一个半透性活塞（分别只容许一种气体通过）与容器A相连，三个通道都另有可启闭的活门与B相通。把容器A中的1摩尔N_2和3摩尔H_2通过半透性活塞分别引入第一、二通道，在等温下从分压为P_{N_2}和P_{H_2}分别可逆地压缩（或膨胀）到P_{N_2}'和P_{H_2}'，然后控制活门，将无限小量的N_2和H_2（其摩尔数比保持为1：3）引入箱B中，于是箱B中N_2

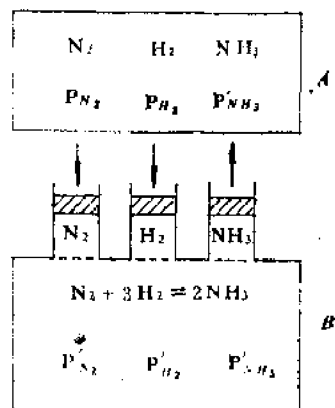


图4.3　用范霍夫平衡箱研究气相反应的思想实验

---

① 傅献彩等：《物理化学（1979年修订本）》上册，156—159页。

②、③ I.M.克洛兹、R.M.罗森伯格著，《化学热力学》，人民教育出版社，1981年，355—358、265—267页。

④ 吉林大学等，《物理化学基本原理》上册，人民教育出版社，1976年，94—96页。

⑤ 同①，16—17页。

和H_2的分压均增大无限小，使反应向合成氨方向进行，产生出无限小量的NH_3来。再把此无限小量的NH_3引入第三通道。如此每一步进行无限小的反应，一步一步反复进行下去，经过无限长的时间，将把1摩尔N_2和3摩尔H_2全部反应完。对于生成的2摩尔NH_3，在第三通道中将其分压从P'_{NH_3}可逆地变为P_{NH_3}，然后引入容器A。这全部过程是一个可逆过程。计算此过程的ΔG，可得反应等温方程式：

$$\Delta G = -RT\ln K_p + RT\ln Q_p,$$

$$式中K_p = \frac{P'^2_{NH_3}}{P'_{N_2}\ P'^3_{H_2}},\quad Q_p = \frac{P^2_{NH_3}}{P_{N_2}\ P^3_{H_2}}。$$

在结构化学中研究分子和晶体的对称性时，常常要在想象中依靠某些对称元素（点、线、面、点阵等几何要素）对于分子或晶体的图形进行对称操作（倒反、旋转、反映、平移等），并结合这些对称操作进行分析和推理，得出新的结论。这种方法与思想实验似有类似之处：分子或晶体的图形是操作的对象，对称元素是操作赖以进行的“工具”，对称操作是主体作用于客体的过程。但是，笔者认为，在这里对称元素是纯粹的几何要素，而不是物理要素，所以这种方法不是思想实验。

从以上所述若干种具体的思想实验可以明显地看出，思想实验既具有科学实验的特征，又具有思维过程的特征，它包含理论思维，进行时需要作分析和推理。但思想实验不仅仅是逻辑思维过程，它还有明显的感性标志和实验的特征。在思想实验中必须有感性的图象，即想象中的实验装置（一般都要借助于图）；还必须有操作过程，即想象中的实验过程。思想也是主体（实验者）借助于工具作用于客体（实验对象）的过程；思想实验也需要经验性条件。这些都是它与实际实验一致之处。但在思想实验中主体和客体都是设想的，实验条件虽然不是纯粹观念性的，但也不是真实的物质条件（库恩称之为“物理似真性条件”）。这些是它不同于实际实验的特点。由于思想实验具有这些特点，所以它不仅比实际实验较易进行，能节省时间，减少物质损耗；而且它比物质实验更便于纯化实验条件，保证客观过程以其纯粹的形态进行，以便深人揭示客观过程内部的规律性，取得明白确定的结果。所以，以实际实验为基础的思想实验对于理论研究常常是富有成效的。在化学发展史上，前述卡诺、范霍夫等人的思想实验对于研究和发展化学理论就都起过重要的作用。至于用来表述有关的科学理论，则前述各类思想实验直到今天在物理化学课程的教学中仍是不可缺少的。因此，有必要对于思想实验的特征和本质以及化学中各类思想实验的特点，深入地加以研究。

许 健

8. 数学方法在化学发展中的作用

定量方法使化学成为一门科学

十七世纪以后，人们开始从量上研究各种化学反应，定量方法的应用，促使化学从炼金术中解放出来，从而开辟了近代化学的新时代。

英国化学家波义耳首先引入定量的化学实验，使化学开始与计量相联系。他经过定量实验，逐渐对当时流行的亚里士多德的“原性说”和巴拉塞尔士的“三元素说”产生了怀疑。他曾将各种金属分别密封在玻璃烧瓶中猛烈加热，使金属变成金属灰（氧化

物），然后称量生成物的重量，发现重量有所增加。波义耳把这种现象说成是火的微粒穿透玻璃与金属化合的结果，认为金属灰决不是金属分解后留下的什么“土”元素，而是比金属本身更要复杂的物质。在定量实验的基础上，波义耳批判了炼金术士对物质组成的原性说，为化学元素指明了科学的概念：“我所指的元素，就是那些化学家讲得非常清楚的要素，也就是某种不由任何其它物体构成的或是互相构成的原始的和简单的物质。”① 波义耳的元素概念是化学发展中的一个转折点。

在波义耳以后，定量方法的研究更加普遍。有一些化学家应用定量的方法发现“固定空气”（CO_2）、氢气和氮气，并逐步认识气体的多样性和空气的复杂性。法国化学家拉瓦锡工作的突出特点就是善于用定量的方法，以天平作为研究化学的工具。1774年他用锡和铅分别放在曲颈瓶中，封闭后准确称量金属与瓶的总重量，然后再加热，使金属变成灰烬，发现加热前后总重量没有变化。其后，一方面他发现金属本身经煅烧后重量却增加了，另一方面他把瓶子打开时听到空气冲入瓶中的声音，瓶和金属煅灰的总重量增加了，而所增加的重量和金属煅烧后增加的重量恰好相等。事实使拉瓦锡对“燃素说”发生了极大的怀疑。在普列斯特利的启发下，他成功地从汞煅灰中分解出了比普通空气更加助燃、助呼吸的气体即氧气。这一实验有力地否定了燃素说，证明可燃物质的燃烧或金属变为煅灰并不是金属－燃素＝煅灰，而是金属＋氧＝煅灰（氧化物）。从1772年到1777年，拉瓦锡又作了大量的燃烧试验，并对燃烧后产生和剩余的气体也一一加以研究，终于在1777年建立了科学的燃烧学说。拉瓦锡在否定燃素说后，又对金属的氧化与还原反应进行了很精确的定量研究，建立了化学反应的质量不灭定律，他指出：“无论是人工的或自然的作用都没有创造出什么东西。”② 由此也导致了化学计量学的产生。化学计量学是研究化合物的组成以及在化合物形成过程中反应物之间和反应物、生成物之间的量的关系，这种研究使人们对化合物和化学反应从定性的了解向定量的认识前进了一步。

同样，化学的当量定律、定比定律和倍比定律等，也都是人们在制药和一系列科学实验中对各类化学反应进行定量研究的结果。1802年费歇尔（E. G. Fischer）列出了第一张酸碱当量表，得到化学反应当量定律。1799年法国的普罗斯（J. L. Proust）在精密研究的基础上明确阐述了定比定律，指出“两种或两种以上元素相化合成某一化合物时，其重量之比例是天然一定的，人力不能增减。”③ 1803年道尔顿也曾分析两种碳的氧化物（CO、CO_2），注意到两种氧的重量之比为1∶2。后来他又分析了沼气和油气（乙烯），明确与同量碳相化合的氢的重量比为2∶1，由此提出了倍比定律：“当相同之两元素可生成两种或两种以上的化合物时，若其中一元素之重量恒定，则其余一元素在各化合物中之相对重量有简单倍数之比。”④

道尔顿对原子质量的研究为他的化学原子论提供了数量依据。他根据大量的实验，分析了各种化合物的组成，规定氢原子量为1作为基准，利用当时已掌握的一些最好的分析结果进行了原子量的计算，一共测出了20种不同元素的相对原子量。世界上第一张

---

① 〔美〕亨利·M·莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，126页。
② 同上，162页。
③ 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，91页。
④ 同③93页。

原子量表出现在1803年道尔顿宣读的论文里。尽管他的原子量误差很大，而且还不了解原子价的意义，可是毕竟从此以后，化学开始走上了定量的阶段。导致了门捷列夫发现元素周期律，证明原子量的变化引起元素质变的事实，使化学形成一门系统的科学。

数学方法为化学的研究提供重要的工具

形式化的数学语言作为研究工具，在化学中显得越来越重要。化学定律的叙述，化学反应的计算，分子的结构，化学键理论都离不开数学式或图表。如果说十九世纪初数学应用在化学中是最简单的一次方程式，那么在今天化学中所应用的数学早已超出了微积分的范围，数学提供了精确的科学语言便于在化学领域内进行定量的分析研究，同时也为化学的理论发展提供了抽象思维工具。

（1）数学表达式使化学定律得到清晰明确的表示。

许多化学定律靠文字说明总是不够清楚准确，而一旦写出数学表达式就使问题显而易懂，能深刻揭示化学过程的本质。化学定律用数学式表示的例子不胜枚举。化学动力学中的质量作用定律，它表示反应速度与反应物浓度的关系：假定化学反应为$bB+dD\rightarrow gG+rR$，则反应速度用数学式表示为$-\frac{dC_B}{dt}=KC_B^bC_D^d$或$-\frac{dC_D}{dt}=K'C_B^bC_D^d$；热化学中表明反应热与温度关系的基尔霍夫定律：$\Delta H_T=\Delta H_{T_0}+\int_{T_0}^{T}\Delta C_p dT$；化学动力学中的阿伦尼乌斯指数定律：$K=Ae^{-\frac{E}{RT}}$，表示速度常数K与温度的关系。

化学主要是研究物质的组成及其变化规律的，每当定量地表示某些化学现象、化学变量的关系时，就需要运用数学作为工具。例如相平衡理论中单元物系两相平衡的克劳脩斯-克拉普朗方程$\int\frac{dP}{d}=\frac{\Delta S}{\Delta V}$，电化学中原电池的基本方程式，反映了电极电位与电极反应前后物质的浓度的关系。还有化学平衡中的吉布斯-亥姆霍兹方程，表示温度变化与自由能、焓的变化关系。

有些数学式还能定义化学中的状态函数。化学热力学中热函H的定义是$H\equiv U+PV$，这样就能导出$\Delta H=H_2-H_1=Q_p$，即恒压过程中所吸收的热等于该过程中热函的增加。自由能的定义是$F\equiv U-TS$，自由焓的定义是$G\equiv H-TS$，在化学平衡理论中，为使实际气体在化学位变化上具有跟理想气体同样的形式，定义纯气体的逸度。f在恒温下满足如下的微分关系式：$d\mu=RTd\ln f$。

除了数学式以外，化学中还大量应用几何图形来表示分子的结构，用各种图表来表示化学变量之间的关系，使理论研究更加直观化。

（2）数学语言便于化学中的定量研究。

由数学表达式出发，可以对化学反应中的一些量进行确定的计算。偏导数在热力学中的应用，微分方程应用于化学动力学和电化学中，张量在核磁共振波谱和极化率问题中的应用，各种正交归一多项式集应用于量子化学等问题，都是化学中的定量研究。例如根据热化学基本定律基尔霍夫定律，可以从某一温度下的一个化学反应的焓变来计算另一温度下该反应的焓变；根据质量作用定律，一旦知道速率常数与某一反应的级数，就可以从任何组分的反应物浓度计算其反应速度；根据电化学中能斯特方程式，可以在已知电池离子浓度的情况下，计算电池的电位；根据热温商的定义$dS=\frac{dQ_{可逆}}{T}$，可以计

算在各种条件下的熵差Δs，等等。

由数学式作出的定量计算结果，可以帮助分析和判断化学反应能否进行、进行的方向及化学平衡移动问题。例如用熵来判断过程的方向性：根据在隔离物系或绝热过程中$dS \geqslant 0$，当计算出$\Delta S = 0$，则表示是一个可逆过程；当计算出$\Delta S > 0$，表示过程不可逆，能够自发进行；当$\Delta S < 0$，表示这过程不能自发进行。再如对常见的恒温恒压下进行的化学反应或相变化，可用自由焓判据：当$\Delta G = 0$，是可逆的变化过程，$\Delta G < 0$是自发过程，$\Delta G > 0$是非自发过程，反应不能自发进行。又如根据平衡常数K可以判断反应中各种因素对平衡组成的变化，从而对勒夏特列平衡移动原理从热力学上加以证明并给出定量的结果：对吸热反应，当温度升高，则K增大，平衡向产物增加方向移动；对恒压时体积减少的反应，总压增加时平衡也向产物方向移动。原料配比和惰性组分影响也可由此判断。

从数学式进行逻辑推导，有时还能推出极其重要的原理。例如1902年能斯特由绝对温度零度时$\Delta G = \Delta H$，进行数学推导：$\lim\limits_{T \to 0}\left[\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right]_p = \lim\limits_{T \to 0}\left[\frac{\partial \Delta H}{\partial T}\right]_p = 0$，而$\left[\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right]_p = -\Delta S$，所以$\lim\limits_{T \to 0}\left[\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right]_p = \lim\limits_{T \to 0}(-\Delta S) = 0$，从而得出重要的推论：当温度趋向于绝对零度时，纯晶体之间的化学反应的熵变趋向于零。这就是能斯特热原理。后来普朗克又根据统计理论提出热力学第三定律：各物质的完美晶体在绝对零度时，熵等于零，即$S_0 = 0$。

（3）数学为化学提供抽象思维能力

数学的应用不仅在于它是计算工具，更主要在于它是思想工具，在于它所独具的抽象能力。依靠这种抽象，在化学中形成许多理想模型，如理想气体和理想溶液等。所谓理想气体是绝对符合$PV = nRT$状态方程式的气体，这实际上是一种思维抽象，是一切气体在低压及较高温度下的极限情况，可以认为分子之间无作用力，同时分子本身的容积也可以忽略，这就建立了理想气体模型。所谓理想溶液就是在全部浓度范围内都符合拉乌尔定律的溶液，其微观特征是各组分分子结构非常相似，分子大小基本一样，同类分子间及异类分子间相互作用力都相等，宏观特征是形成溶液时不产生热效应和体积变化，这也是溶液的理想情况。

依靠数学的抽象能力，形成化学的许多抽象概念，例如状态函数“熵”。

根据在极限情况下任意一个可逆循环的热温商之和等于零，即$\oint \frac{dQ_{可逆}}{T} = 0$，而按数学积分定理，若沿封闭曲线的环积分为零，则所积分的变量一定是某一函数的全微分，这一函数就是熵。所以“熵”是在实践基础上数学抽象的产物。

另外，在化学理论中，为把握经验无法把握的东西，必须用数学的抽象思维来把握。在量子化学中，为了把握原子中电子运动的状态，根据电子的波性，可用波函数Ψ来表示，波函数的形式为$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$，其中n、l，m分别为主量子数、角量子数和磁量子数，Ψ的具体形式不同，代表电子的不同运动状态。分子轨道理论认为能量相近的原子轨道可以组合成分子轨道，分子中的电子在一定的分子轨道上运动，为了有效地组成分子轨道，需要满足“能量近似条件”、“电子云最大重叠条件”和“对称性条件”。因此把握分子轨道，除了需要数学计算，更重要的必须用数学的抽象思维能力。

数学方法使化学由经验向理论科学过渡

化学自从十九世纪初跨入近代化学阶段以来，相继建立了原子分子论，元素周期律，原子结构，分子结构等几大理论基础，使化学逐步从经验性或半经验性的发展阶段中摆脱出来。五十年代后量子化学有了较快发展，特别是分子轨道理论的近似计算方法不断得到改进，已经发展到半定量的水平。到六十年代由于电子计算机的进步，使许多过去难以计算的问题得到了解决。现代化学发展的一个总的趋向是，要在实践基础上积极发展化学理论，提高理论指导实践的能力，而数学方法的大量采用，正为此提供了有力的工具。

（1）求解氢分子的薛定谔方程，开创现代化学键理论

本世纪二十年代量子力学建立，量子力学方法引入化学研究，化学开始使用线性算符、矩阵、希尔伯特空间等复杂的数学形式。1927年海特勒、伦敦首先把量子力学应用于化学，试图计算分子中电子运动的规律，以此来解决经典价键理论所碰到的困难。他们用变分法求解氢分子的薛定谔方程，得到了H_2的两种近似状态Ψ_S和Ψ_A，及其相应的能量E_S和E_A。E_S和E_A也是核距间离R的函数，从E—R图（图4.4）中可以看出，与状态函数Ψ_A相应的能量曲线E_A没有最低点，所以在Ψ_A状态的H_2是不稳定的，称为排斥态；而与状态函数Ψ_S相应的能量曲线E_S有一最低点，在最低点上氢原子间的吸引作用达到极大，可以把两个氢原子通过化学键结合起来，形成稳定的H_2分子，故称Ψ_S为基态。计算得到最低点的能量为72.3千卡/克分子，核间距为0.87埃（与实验值有误差）。这就解释了氢分子中共价键的实质问题。通过用薛定谔方程研究氢分子，开创了现代化学键理论的新阶段。

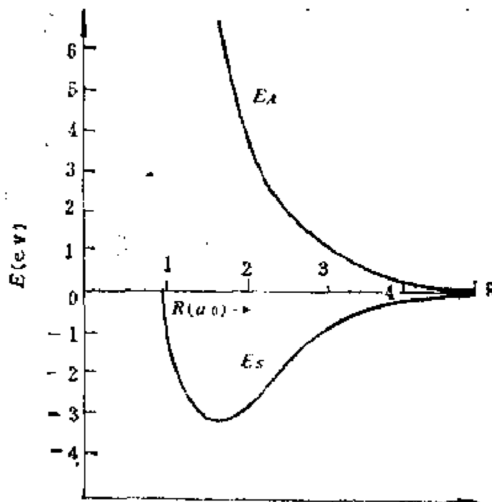


图4.4　E—R图氢分子的能量曲线

（2）应用群论计算分子轨道

群论是现代化学研究中的一种重要的数学方法。群论从分子对称性出发描述化学对象，从而可以根据波动方程进行量的计算。为了阐明共价键的形成，三十年代初建立了两种化学键理论，即价键理论和分子轨道理论。在分子轨道的计算中，为了确定分子轨道能量，必须求解出形式为原子轨道Φ线性组合的分子轨道Ψ，这就要求解所谓的久期行列式，把它展开，给出能量E的n次多项式，该多项式的n个根是E的稳定值，于是形成分子的一系列能级。在求解过程中虽然可以引入“休克尔近似法”使久期行列式简化，但是对于多原子分子，久期行列式方程仍然相当复杂，而借助群论，只要把n个不可约表示基函数中属于同一不可约表示的同行基排在一起，哈密顿矩阵就成为准对角矩阵，它的久期行列式也就劈成几个较小的分行列式乘积了①，从而大大简化变分法和微

① F.A.科顿，《群论在化学中的应用》，科学出版社，1975年，129—130页。

扰法的计算。

一经由解方程确定了能级，就可按泡里不相容原理，每个轨道允许填充两个电子，从最低能级开始把有效电子逐一填人这些能级。假若电子太少，不足以填满一组简并分子轨道，则用洪特规则，使具有平行自旋的电子在填充过程中尽可能保持在不同轨道上。可以看到，应用群论并不需要复杂的数学计算，仅从对称性出发就可以得出许多有用的结论。分子的对称性是可靠的，所以由对称操作群的数学模型所得到的结论也是严格的。这种方法能以定性或半定量的方式普遍说明一些化学现象，尤其是描述分子处于基态时的情况，它的计算方法比较简便，被广泛应用于有机结构理论中。

（3）利用轨道能量相关图来判断反应可能进行的方式

原子轨道和分子轨道除了在数学上用波函数来表示外，还可用更形象化的几何图形——反应前后分子轨道能级相互关系的图像（能量相关图）来表示。有了相关图就可以立即对反应的可能进行方式作出判断。由于反应物分子的成键轨道数目与产物分子成键轨道数目相等，故当反应物分子和产物分子的成键轨道中所含的对称轨道数目相等时，则所含的反对称轨道数目也相等，这时就不会出现成键轨道与反键轨道间的相关线，所以反应为对称允许反应，这种反应只须加热就能进行。反之，若反应物分子和产物分子的成键轨道中所含的对称轨道数目不相等时，就会出现成键轨道与反键轨道间的相关线，因而反应为对称禁阻反应，这种反应的活化能较高，必须在反应物分子处于激发态的条件下才能进行①。

（4）利用能级转化图来推求活化能

对一些没有对称性的化学反应，用能量相关图无法讨论时，利用从反应物到产物的能级转化图，不但能对反应的可能方式作出判断，而且由于这种能级转化图是经过定量计算的，因此可以进一步从曲线的最高点求得反应活化能的数值。例如丁二烯的闭环反应中，计算所得的活化能数值达到了实验值的70—80%，这样的结果是很合理的，因为这只考虑了π电子的能级转化对活化能的贡献②。

能级转化图方法不仅适用于整个分子轨道理论，而且也可能对整个分子轨道理论产生影响，并且向定量化的方向发展开辟了道路。化学将发展到一个新的理论高度。

总之，过去几十年里，数学与化学的关系发生了急剧的变化，数学在现代化学领域中已成为不可缺少的重要工具。数学方法在促进化学学科的发展方面所起的积极作用，日益为化学科学和教育工作者所重视。

盛　维　勇

9.结构化学研究中若干辩证思维方法问题

结构化学，是研究化学物质的微观结构及其与宏观性能相互影响、相互制约的基础科学，是化学学科的重要分支。建立在现代物理研究手段（包括量子化学和电子计算机）基础上的现代结构化学，不仅成为揭示、认识宏观世界纷繁复杂，变化万千的化学

① 唐敖庆等：《分子轨道图形理论》，科学出版社，1980年，176页。
② 吉林大学等：《物理化学基本原理》（下册），人民教育出版社，1978年，534页。

现象、物理性能和生物活性的必要手段，而且也是能动地改造客观物质世界，向自然界索取自由的重要利器。现拟从辩证的角度，对结构与性能，研究手段与思维方法，精确与毛估，局域与离域及模型方法等几个侧面作一概述。

物质的结构与性能

物质的结构与性能的问题，是辩证思维的重要命题之一。而结构化学正是研究这种微观结构——分子、原子层次的化学组成、几何空间结构。电子结构及这些物质内部基本微粒间相互作用的化学键本质，与其宏观的化学性质、物理性能和生物性状间相互联系的基础科学。经典的化学结构理论指出：物质的内部结构，完全决定了它的典型化学反应性能（实际也同时决定了许多其它方面性能）；反过来，通过这些典型化学反应性能的研究，原则上亦应能定出化学结构，甚至立体结构的一些轮廓。金刚石与石墨都是含碳的单质，且形成了不寻常的巨分子。前者，为无色极坚硬的晶体，后者却是黑色光滑的片状物。这是由于碳原子间具有不同的键合方式。金属、半导体、绝缘体材料具有截然不同的导电性，归结于它们有不同的能带结构。血红蛋白中，由于个别氨基酸排列顺序的差别，可影响与活性中心铁卟啉的结合，因而影响了肽链的正常折叠，或削弱了亚基间的变构效应，从而不同程度地影响了血红蛋白的正常功能，造成了所谓分子病。同一金属的不同截面或台阶面，裸露出不同原子排列或配位情况，因而使作用于其上的分子、原子呈现不同的吸附、催化特性。而具有相同的分子组成和空间结构，但具有不同的电子排布的基态和激发态分子（这种现象叫做电子异构体）。则显示各异的化学反应性。

以过渡金属原子为中心，周围配位以有机的或无机的基团和原子，而形成的单核的、双核的和多核的过渡金属配位络化物（后者一般称为过渡金属原子簇化合物），是目前结构化学中非常活跃的领域。各种小分子（如N_2、H_2、CO、NO、烯烃等），在一定条件下，通过和过渡金属配位络合而获得活化，从而引起一些基元反应得以进行（如CO的插入反应、氢的加成反应等），因而使某些过渡金属络合物成为聚合、氧化还原、异构化、环化、羰基化等反应的高效、高选择性催化剂。这些小分子的络合活化，是与络合物中心原子的氧化态、电子构型、配位体种类、配位数和立体构型密切相关的。许多金属原子簇化合物，显示出特殊的性能。如具有立方烷型簇骼Fe_4S_4的〔Fe_4S_4（SR）$_4$〕是一种优良的电子传递体。最近合成的镍原子簇化合物Ni_4（CNBUt），（BUt＝叔丁基），具有良好的模板合成催化性能。这里4个Ni原子排成一个正四面体，简直可看成过渡性的金属键，可设想是络合催化剂和金属催化剂的中间环节。从结构化学资料的系统总结入手，寻求络合催化的结构化学规律性，并借助量子化学的理论。相信有助于突破世所瞩目的化学模拟生物固氮模拟物的合成问题。

我国稀土元素资源丰富，综合利用大有可为。从结构化学角度看，除个别元素外，稀土金属原子均含有4f电子，是广义的过渡元素。正象d型原子轨函的方向性，要比s型、p型显著得多，f型原子轨函就应该更加显著。因此，掺杂少量稀土金属，能显著改变合金的机械性能。而稀土络合物可作为烯烃定向聚合催化剂，是可以理解的。

以上所述的结构，应包括空间结构和电子结构两部分。两者是互相关联，不可偏废的。历史上苏联学者巴兰金（А. А. Баландин）曾提出“多位理论”，来说明催化力

决定于催化剂分子与反应物（也叫底物）分子几何空间的适应性（包括催化剂分子的表面晶格间距和表面原子排列）。根据这一理论，巴兰金成功地解释了苯加氢变成环已烷的反应，只有在那些满足上述空间要求的Ni、Cu、Ir、Pt、Pa、Zn、Os和Co的特定晶面上才具有催化活性，而Ca、Th、Fe不满足上述空间要求，故无此催化活性。巴兰金理论，虽然说明了某些催化现象，但他没有考虑到电子结构这一因素对催化行为的重要影响，所以他在解释众多的催化现象时，遇到了根本性困难。这说明表面的化学组成、几何空间结构和电子结构对催化的作用，是互相联系、互为表里不能分割的。我们知道，与催化活性有关的电子结构参数，是强烈地依赖于表面化学组成，而表面组成的改变，又跟表面结构的变化相联系。因此，要在空间因素与电子因素间划一分界线是不可能的。

必须指出：结构化学除上述静态结构外，还应包括动态结构和准动态结构。这对超快的分子过程、多光子过程、电子能量转移、各种激发和退激发过程、化学反应的中间体研究、生物活性大分子的构象变化等的研究，都是必不可少的。

物质结构的研究手段和思维方法

（1）研究手段概述

工欲善其事，必先利其器；学欲研其精，必先磨其技。这是众所周知的常识。现代结构化学的研究是建立在各种衍射、光谱、能谱、波谱、质谱、热谱、色谱、电子显微镜、电化学、激光技术、动态测试技术（如微微秒 $=10^{-12}$秒）光脉冲激光技术、激光闪光光解仪和电子计算机等所组成的庞大的高、精、尖综合探索系统。它从物质的表面相到体相，以静态到动态，从空间结构到电子结构，进行广泛的分析综合工作，从而提供了大量有用信息。包括分子中原子排列的空间形式（如键长、键角、配位结构等），元素的组成、比例及电子结构（包括电子的组态、电子云密度、电子的空间排布及电子的能级等）及动态信息（包括反应中间产物的构型变换、电子在各能阶存活的寿命、晶格的振动转动模式等）。有人曾作过统计，仅表面结构所用的各种探针（包括光子、电子、中性粒子、离子、声子和电磁场）即有90多种。

现代结构化学探测的特点是：精密的分析和高度的综合。它除了广泛采用物理手段，具有高灵敏度、高分辨率、快速、实时、自动控制、记录并进行数据处理外，还广泛采用多机联用技术。以表面测试为例，由于每种表面分析技术都有其局限性，近年来发展了由能谱仪、衍射仪、质谱仪和显微技术等组成的多机联用系统（包括电子计算机），它可以更准确更经济地进行表面分析综合工作。

（2）结构化学中的综合——分析和归纳——演绎

由于各种结构测试手段的发展，给我们提供了大量有用信息，这些信息激发人们去思考、推敲它所隐含的结构含义，因而相对独立地发展了各门学问：如X射线结晶学、分子光谱学、磁共振波谱学、质谱学、能谱学等，而现代的结构化学正是基于这些谱学基础上以阐明物质的分子、原子层次的基础科学。但我们又如何从上述测试手段所提供的各种信息中，找出它们间的有机联系，求出其因果关系，总结出必然规律呢？这就有赖于我们正确应用唯物辩证的科学思维。

第一，分析综合和综合分析

由于各种测试分析手段，都有其各自的局限性。如红外光谱只适于那些振动、转动跃迁前后有偶极矩变化的分子；而拉曼光谱则要求有极化率变化，才能在光子激发时引起振动、转动的能级跃迁；核磁共振仅对有核自旋的分子才能显示；电子顺磁共振，仅对有不成对电子的分子才有信号；而质谱只能给出分子碎片的质量/电荷比的信息，所以它不能对具有相同质量的碎片离子或同分异构物离子作出判别。因此，我们在进行结构分析时，总是应用各种探针施之于物体，从中得到各种信息，然后再把这些信息综合起来，通过去粗取精，去伪存真、由此及彼、由表及里的联贯思索，最后再作出判断来。例如我们在进行天然有机化合物的结构分析时，首先要从大量的天然有机物中，提纯、分离出各种不同组分的纯物质或有效组分，然后再根据红外光谱、紫外光谱、核磁共振谱和质谱所提供的不同角度的信息，经分析、综合、推理、判断常能作出合逻辑的结构鉴定。因此，我们把这种从分析到综合的思想方法叫做分析综合法。但我们进行结构测定的目的，在于掌握性能与结构之间的联系，从而找出设计合成的内在规律。只有我们真正了解分子结构及其化学键本质，我们才能把握分子。大规模集成电路中的集成块，若能听命于人工的控制安排，我们就能制备出“分子电路”。我们从分子的基态和激发态的几何构型、能级高低、电荷分布、偶极矩、势能面等结构参数为分子设计提供基础。例如我们从N_2分子的能级结构，找出N_2的异常化学稳定性原因，从而找出活化N_2的结构因素。许多生物活性大分子：蛋白质、核酸、天然有机化合物、药物、染料的研究、模拟、合成和改性，也往往是先从大量原材料（动物、植物、微生物）中经提纯分离出纯物质后，进行组分测定、结构鉴定最后再把它合成出来。最近日本化学工作者，还报道了利用质谱碎片进行设计合成的思想。例如，他们以一定能量的电子轰击吴茱萸碱，得到稳定的二个碎片，从碎片可说明键的易断裂点所在，他们以此二“碎片”为起始反应物，则可一步合成出与天然吴茱萸碱一致的产物。这说明结构的阐明者（从分析到综合），往往是全合成的工作者（从综合到分析）。所谓“合成树”的思想，即是这种综合分析思想（如图4.5所示）。

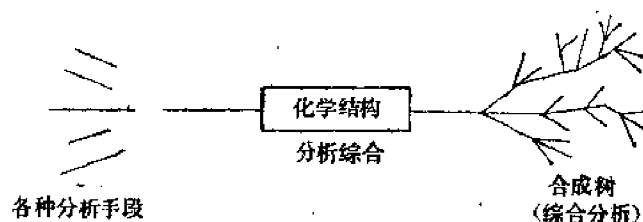


图4.5 “合成树”思想示意图

因为物质的结构是“一”，而合成的途径则有多种多样。故从已知的结构出发，必须采用综合分析方法，考虑所有可能的反应途径，并对可能的前体结构也进行类似的考虑。如此层层分支形成所谓“合成树”，从中经对比分析，得到最优的合成路线。这种从结构的阐明（从分析到综合），到指导合成甚至设计合成的研究（从综合到分析）；再从合成的探索，反馈到结构的确证最后达到完全自洽的认识过程，就完成了科学的思维过程。

第二，归纳——演绎

我们通过科学试验，应用辩证思维方法，把自然界纷繁复杂变化万千的自然现象，

进行科学分类，从而找出它们间的相互联系和变化规律。门捷列夫的元素周期律是对元素进行科学分类的光辉典范。而要对分子、晶体中原子的空间排列、电子的轨函排布，进行科学的分类，则要靠对称性原理了。人们很早就从晶体的外形及其特性（均匀性、各向异性和空间的对称性），推测到晶体内部结构的规律性。但要对千态万状的晶体，进行科学的分类，就要对它进行很好的分析与抽象思维。正如欧几里德用简单的几条几何学公理，演绎出皇皇大观的欧氏几何学一样。人们按照晶体的外形，根据几何学原理，把它抽象出7个对称要素，然后用演绎方法推导出7个晶系、14种点阵型式、32个晶体学点群和230个空间群。而群论方法，则给这些空间形式以准确而简洁的数学描述。空间群理论，是经典化学中关于晶体结构的最完备理论，它对晶体结构分析起着重要指导作用（尽管在实际中我们只观察到属于为数有限的空间群晶体）。从归纳到演绎，再从演绎来指导化学合成的另一范例是伍德沃德—霍夫曼从大量的有机合成的实践中，归纳出分子轨道对称守恒原理——反应前后分子轨道的位相（包括轨道形状、对称性、节点数目的广义位相等）仅以经受最小的变化而守恒着。而这一原理反过来，又推动了维生素B_{12}的全合成。这是有机化学合成史上，最难能可贵的生动事例。我们知道B_{12}是由四个含N的五员环联成大环。环中心通过CO^+离子而与四个五员环中的N杂原子及CN基等配位络合起来。且大环骨架内有9个不对称C原子，因而可能有512个异构体。要合成这样复杂的立体异构体，只有把有机反应机构、每个基元反应，作演绎的理解，按化学因果律，根据反应中分子轨道位相以最小变化这一微观的变化规律，来判明及诱导分子按一定路径进行反应，才能从512个立体异构体中选择得到我们所需的产物。1978年，高瑞（Corey）报道了他用倒推法（antithetic analysis）来指导赤霉素A_3的全合成。赤霉素A_3含有8个不对称C原子，但由于官能团的特殊排列方式，以及几个易变部位的互相牵制，甚难合成。他们从愈疮木酚开始，经42步反应合成了与天然物一致的赤霉素A_3。

人们的认识过程，往往从宏观到微观，从现象到本质，从个别到一般，从归纳到演绎，从功能到结构。但当科学发展到一定阶段后，有可能使认识过程来个逆转，使人们从长期实验观察中归纳出的规律，转变为演绎的基础。上述维生素B_{12}和赤霉素A_3全合成的成功，生动地说明了用演绎推理法来指导合成的可能性，从而结束了那种单凭有机合成化学家的经验、直觉来合成的时代。正如综合与分析一样，归纳与演绎也是辩证统一的。因为作为演绎基础的基本性原理，往往是从归纳产生的。例如，蒋明谦从大量的有机化合物中，归纳出有机化合物的同系线性规律。他打破传统类型反应观念所遵从的基团电子效应的束缚，以对立统一法则来处理分子的整体性和基团的独立性，着重寻找出体现分子整体性的结构因素，导致了他的同系序数和能级序数构成的同系因子的发现，并利用同系因子这个结构因素，来联系与分子中电子活动有关的各种物理、化学性能，找到了有机化合物的同系线性规律。

在结构化学的理论思维中，我们要特别提一下国际知名的结构化学家鲍林的治学方法，作为借鉴。他既善于从繁杂的实验事实中，通过抽象思维把现象与本质联系起来，又善于从量子力学的方程中引出直观模型，使概念形象化，他不仅长于归纳，而且深明演绎。他不仅是量子力学价键理论创始人之一，而且也是应用原子参数、键参数研究分子晶体和化学键本质的主要倡导者。而鲍林关于电负性和共振论的概念，不仅立足于大

量事实而且也凭借量子力学的一般原理的启发和指导。

精 确 与 毛 估

"一线阳光穿云出，愈见姣妍，

人间的万象真理愈求愈模糊；

——模糊中偶然见着一点光明，真愈觉姣妍。"

这是周恩来同志在《雨中岚山——日本京都》中的诗句。他以生动形象的语言，道破了深刻的哲理：真确兮模糊所伏，模糊兮真确所倚。毛泽东同志在《论持久战》中说道："客观现实的行程，将是异常丰富和曲折多变的，谁也不能造出一本中日战争的'流年'来。然而给战争趋势描画一个轮廓，却为战略指导所必需。"又说："战争没有绝对的确实性，我之一方是比较地确实的。敌之一方很不确实，但也有朕兆可寻、有端倪可察、有前后现象可供思索，这就构成了所谓某种程度的相对的确实性，战争的计划性就有了客观基础。"这又给我们指出了精确的相对性和我们对之进行毛估的必要性。

（1）科学研究尤其是基础科学研究，它既是探索未知世界，揭示其内在矛盾；同时，又是展望未来统观全局的远景筹划。

爱因斯坦曾指出，提出一个问题比解决一个问题更重要，因为解决问题也许仅是数学上或实验上的技能而已。而提出新的问题、新的可能性，从新的角度看旧的问题，都需要有创造性的想象力，而且标志着科学的真正进步。在我们探索科学的道路上，常有在推理论据还不充分（或根本无"理"可依，需要我们去创立新的原理），情况尚还朦胧时，而需要我们有作出科学的论断、猜测、估计的非凡能力。我们说科学是精密的、确定的，这只是对研究对象的不确定性的某种程度的简化、抽象的一种描述。而实际过程，则往往十分复杂带有不确定性或模糊性。一种不确定性是在于事件出现的频数不够大或不能取得大量有关信息，因而表现为不确定性。这种不确定性，可以通过概率统计的方法来解决。而另一种不确定性，则属于事物本身的固有属性，而产生的模糊性。建立在几条公理上的欧几里德几何学，是十分精密的，但它只适于有限空间，对于宇宙空间它就失效了，而代之以非欧几何学。从氢原子谱线的跃迁谱系中，我们可以看到理论计算和实际测量符合得如此之好，但这仅限于简单的物理体系的情景。对于复杂的生物化学过程、生命过程则现有的数理逻辑就显得不够了。电子计算机虽算得快而准，但它没有人的思维的那样高度灵活性和创造性。人最善于处理模糊对象，如炼钢工人观察炉温、高级厨师掌握火候、中医的辨证施治、艺术家的灵感、科学家的创建等，都能从模糊中察出端倪、看到轮廓、毛估到过程的概况。

（2）所谓毛估是一种近似的（包括半经验的近似计算）定性的、概念性的一种描述、判断、估计和预测。而一切精确的计算则是基于这些正确概念基础上的"上层建筑"。量子力学的计算，几种氢分子近似方法精度的不断改进，都是先定性地考察、分析影响电子云排布的诸种可能性及各种力的作用、性质及其相对大小，即对影响电子运动的动能、库仑能和交换能作恰当的估计，然后才能得到好的结果。这说明定性的判据对精确的计算的重要性。爱因斯坦根据光速的有限性，推出在广漠的宇宙中不存在"同时性"概念，因而突破了牛顿式的"时空观"（用绝对光速概念，代替绝对时间概念），

建立了狭义相对论。但在广义相对论中，若仅仅突破了“惯性质量”和“引力质量”的等价性这一关键性矛盾，还不足以建立广义相对论。而只有通过黎曼几何这一精密的数学方法，才能深刻地揭示其内在的固有联系。

（3）科学不是从纯粹理性中推敲出来的，它大部分是人类系统化的经验，而建立在实验基础上的化学更是如此。

据称量子化学的发展已进入第三阶段，从一个数量级范围内与实验相符合，到能非常接近实验测量的比较精确的计算，进而跃到比实验更为精确的计算或者说至少达到了进行理论解释所要求的足够精确度。量子化学的发展，使某些人产生这样的印象，似乎化学的一切问题，都可归结于量子力学波动方程式的求解。但我们知道目前最精确的“自洽场从头计算法”，若采用“原子轨道线性组合”时，其遇到的“多中心积分”计算，是与电子数的四次方成正比例。一个含有20个原子的分子，即可能含有100个电子，所需计算积分即有一亿个。这要求有足够大型的计算机才能胜任。另一方面，计算机还有它的根本弱点，即计算所得数字，有时不知道意味着什么，即计算机所给的数值结果，也象实验室现象一样复杂而不可思议。

除了发展上述精确方法外，在寻求新材料、优选新的催化剂时，我们从大量的实验工作中取得了许多信息，凭借现代结构化学和量子化学基本概念、原理，根据经验参数，然后提出简化的模型进行近似计算，从而总结出经验、半经验的规律。这种经验或半经验方法虽缺乏理论严整性，但它机动、灵活、有效，因而富有生命力。

模型方法是科学研究的基本方法之一

作家通过典型环境中的典型人物的形象塑造来揭示社会现实、阐发人生意义；艺术家通过造型、色彩、线条把生命的原型，生活的真、善、美再现于人间。而科学家则从大量的原始数据，繁多的曲线、图表，由科学概念、基本原理出发，抽象出一定的模型，然后选择合理的近似方法进行计算，最后再引伸出科学的规律来。科学工作者只有抓住支配现象的主要矛盾，才能确立正确的科学模型。这种模型对沟通科学现象与其本质的认识过程，起到了重要的桥梁作用。同时，它给人以简单、清晰的物理图像，直观、明确的物理含义，因而使这种模型方法被广为采用。如经典的理想气体模型，玻尔的原子模型，遗传信息DNA（去氧核糖核酸）的双链螺旋模型，爱因斯坦的有限无边宇宙模型及大陆漂移的板块模型等，都对洞察事物内部的本质，推动各门学科的深入发展，起过重要作用或正在起作用。

在过去几年中，我们曾结合研究课题，运用模型方法，提出固氮酶活性中心的“网兜”模型，电光非线性光学效应的“阴离子基团”模型，雷珀（J.W.Reppe）法制备丁醇的均相催化的原子簇模型等，取得了成果，赢得了国内外同行的好评。现结合我们工作的一些体会，谈谈模型方法的一些特征。

（1）相似性

相似应包括“形似”和“神似”两个不同的认识层次。所谓“形似”是通过模拟自然过程，模拟生物内部机制后，对自然产生的初级认识过程。在这一认识过程中，人们把原型中的“形”经等价相似变换，把它移植到我们的模型中（它属于同态同非同构）。这个相似应包括几何空间构型的相似，化学组成的相似，物理特征的相似，动态反应的

相似等。但我们在向自然学习时，不应只停留在简单的模仿上，我们要通过模仿而有所创造。我们通过把握原型中所蕴涵的原理和机制，从中抽象出比原型更丰富、更精美、更典型的特征，这时就达到"神似"的境界。

我们目前进行的化学模拟生物固氮，即是从固氮酶的能量传递、电子传递、活性中心结构和对底物的反应性（化学探针）等来模拟它的。我们从MokX射线吸收精细结构谱（EXAFS）的微区分析，了解到钼铁蛋白中Mo原子周围的微环境，它的最近邻原子配位情况；从穆氏能谱中，了解铁氧还蛋白中Fe原子周围的配位体键合状态、Fe的价态；从电子顺磁共振谱中，获知离子的价态变化及配位结构对称性；从对底物分子反应中，知道底物的"匙"和酶分子的"锁"的构型相关性等等。我们正是根据这些信息来猜测固氮酶的实体结构的。因为固氮酶是一，故各种模拟条件亦应是同样的。但要从这些模拟中，得到我们上述所说的"神似"，抽象出好的模型（模型不止一个），就要看我们能否把握住支配过程的主要矛盾，是否抓住问题的关键所在。

（2）近似性

模型是原型的近似反映，它突出了事物的主要矛盾或主要特征，而忽略了次要矛盾或次要特征。模型的建立过程，正是不断分析矛盾，抓住矛盾的主要方面并不断解决矛盾的过程。我们从大量酶化学和含氮过渡金属络合物的信息中，对固氮的三个过程络合——还原——加氢作了分析。

我们抓住了N_2分子的异常化学稳定性这一主要矛盾：它既难于氧化（失去电子）又难于还原（得到电子），这可从N_2分子的前线分子轨道的能级分布及其能差Δ_1（即最低空轨函与最高占填轨函间的能差）特别大，而Δ_2（即最高占填轨函与次高占填轨函的能差）又非常小得到反映。因此要通过络合过程，实现N_2的充分活化，一方面既要在π型分子轨函上打主意，设法从反对称的$1\pi u$次高满填轨函抽走电子，同时设法往对称的最低空轨函$1\pi g$送进电子，从而拉低π键键序，缩小Δ_1的异常性；另一方面还要从σ型轨函上出点子，设法拉伸N—N键，压低N核间的静电斥力，扩大Δ_2或者设法从最高满填轨函的$3\sigma g$抽走电子。这是充分活化N_2的前提。但如何实现上述的战略要求，这就要求我们选好主攻方向，配合诸路侧攻力量，同时又要满足防止异构化的结构要求。

据此，我们提出了充分活化N_2的单端基＋多侧基结构设想。通过端基络合以利N—N键的拉伸，从而减少了两个N核的静电斥力，拉低了最高占填的$3\sigma g$能级，使它恢复正常能态，撤走了N_2分子第一道防线的分外防守力量，为三重键（N≡N）的各个击破创造条件而侧基络合，则有利π键的削弱和活化。在多侧基络合构型的协同作用下，甚至可一举冲破N_2分子的头两道π键防线，为N≡N键的裂解铺平道路。依此思路，我们提出了$MoFe_3S_3$模拟物，它是具有网兜状的不完整立方烷原子簇结构（福州模型Ⅰ）。在这里，我们把固氮酶活性中心中N_2的络合活化中心和电子转移中心，通过原子簇$MoFe_3S_3$而融为一体。这里也体现了我们对大自然的模拟，要在"神似"上下功夫。

（3）没有万古不易的定理，自然也不会有恒久不变的模型。得鱼忘筌，我们仅把模型当作研究手段，当作沟通宏观世界和微观世界的媒介。当层出不穷的实验材料和理论，要求对模型作出修改时，我们应把原始模型的出发点及其具体形式的不适当部分作必要的补充、修改，以与新的实验事实相吻合。根据固氮酶钼铁蛋白中Mo周围的X射线

吸收精细结构谱和铁钼辅基（FeMo—Co）的最新结果，我们在原先模型的基础上又推敲出固氮酶福州模型Ⅱ——孪合型网兜模型。即把两个基本上同向平行的网兜型物，通过共有的Mo原子，偶联成一个双立方烷型孪合重烷体Fe_8MoS_8。目前我们已从模拟物的构想，跨到模拟物的合成、结构鉴定及活性评价上，并取得了很好的结果。

必须指出，作为一般的考虑，科学的发展也可能超脱于一切具体模型而取得突破的。如传统的原子模型，汤姆逊的"馅饼式"原子模型，被卢瑟福的"行星绕日式"原子模型所取代，后来有人试图用经典的物理概念，来解释卢瑟福的原子模型，但失败了。因为按经典理论，作轨道运动的电子要不断辐射能量，而终将使电子堕毁于核。后来玻尔吸收了量子论观点，用电子从一个轨道跃迁到另一轨道时，才有能量的吸收或释放的假定来克服上述困难，取得了一定的成功。但从根本上说，玻尔模型仍属于经典理论与量子论的"杂交"产物。这时推动科学前进的不再是新、旧模型的更迭，而必须是解放思想，打破旧观念，建立新的理论体系为契机。

固体物理与表面化学中的长程力与短程力

早期的固体理论，主要以阐明金属的特性为其主要的研究对象。人们发现金属有良好的导电、导热性能，因而假定金属原子周围的价电子是处于独立的、自由的状态，它几不受原子实所束缚，这就产生了"电子气"概念。但当人们的视野从简单的金属转向一般固体时，发现"电子气"概念无法说明一般固体导电性上的巨大差异（它们间的电阻率相差达32个数量级即10^{32}倍左右），这就使人怀疑固体中的电子是否就象"电子气"模型所说那样独立、自由？直至本世纪二十年代，才有人对规整的固体提出了原子按周期点阵排列的概念。他们把每个原子核安置于点阵的中心，而设想价电子是处在这样周期势场中运动的。因此，电子运动轨道服从平移不变性。这一雏型后经布洛赫（F. Bloch）等发展成固体电子结构的能带理论。这一理论，不仅能很好地说明了固体导电性的巨大差异，尤其对半导体材料的研究与发展起了重大的推动作用。但自六十年代后，随着固体化学的发展，表面科学的进步，许多新型有机半导体、"高温"超导材料、电光非线性光学材料、非晶态物质、半导体的掺杂、催化剂的研制、化学吸附的机制等方面的研究，都给固体理论与表面科学以新的巨大的推动力。

人们开始认识到，除了象NaCl那样简单的离子型晶体外，一般稍微复杂的固体物质，其中每个原子或离子周围都有相当复杂的价电子结构，且往往是几个原子首先按一定方式组成基团或原子簇，然后再由这些基团或原子簇配上另一些具有不同电荷的简单离子，按一定次序堆砌而成的。即是说固体的结构单元，不应是简单的圆球状的离子，而应是原子簇。显然，这种原子簇结构模型，符合大多数固体结构的特征，尤其以共价键相结合的固体物质，更是如此。非晶体物质的外延X射线吸收精细结构谱表明，这类物质既非多晶也非完全无序，而是某种短程有序、长短无序的物质。在金属表面吸附的研究中，发现金属表面化学吸附的结构特征和金属原子簇化合物有很多相似处。以$Rh_6(CO)_{16}$为例，它们在金属原子间距和排列上，吸附（或结合）能量上，对CO的吸附（或结合）构型上和键合的能级上，都表现出很大的相似处。利用电子顺磁共振研究氧化镁对H_2/D_2的交换反应的催化活性，发现每1×10^6个表面位置中，只有一个位置（这个位置与表面缺陷有关）对H_2/D_2的交换反应有活性。还有极少量的有毒物质，可使

催化剂中毒；以及同一金属的不同截面或台阶面，有不同的吸附催化、活性。这些现象都说明金属的吸附催化活性，仅发生在金属或催化剂的特殊面、棱或点上，这说明我们可以用局域的表面络合物或表面原子簇，来模拟某些化学吸附催化过程的。

以上可看到，在固体物理和表面科学中存在有两类矛盾：一类是以长程力为主，短程力为辅的研究对象，如固体发光动力学过程，固体的电的（特别是温差发电、霍尔效应），磁的及光的性质等，能带论在很多情况下提供了很好的解释；另一类是以短程力为主，长程力为辅的研究对象，如电光非线性光学效应、缺陷、非晶态物质和表面吸附等，则“原子簇”模型显示其优越性。

能带论虽见到事物的整体性，它把事物看作不可分割的相互联系的整体，这是它的优点。但由于数学上的困难，不得不把构成整体的各个局部作简化的处理，这就给这个完备的整体结构，埋伏下严重的“缺陷”。因而，对那些属于“局域化”的电子运动问题，就陷入了根本性困难。而在“原子簇”模型中，虽对实体的局部微观结构给以精确的描述，但由于它忽略了事物的整体性，因而也必会给那些“离域”的电子运动，造成了人为的“位垒”。有鉴于此，近来学者为使他们的模型臻于完善，必须针对他们模型的各自不足处，进行合理的改造。即是说一者要从远程力出发，逐步包括短程力的影响；一者要从短程力出发，逐步包括长程力影响。这正是斯奇里弗（Schrieffer）和索文（Soven）所说的下一步的研究，将是把两种理论模型的合理部分结合起来，构成所谓相互作用原子簇模型，只有这样才能使问题得到更为合理的解决。

以上所述的几个问题是具有普遍意义的科学方法论问题。我们从物质宏观性能的研究入手，以揭示其隐藏在内部的结构奥秘，而通过微观结构因素的研究来达到有效控制分子的过程，使朝人们需要的方向来剪裁、设计、合成分子，为人类创造出千千万万新颖的、精美的物质世界。要揭示物质世界的奥秘，我们一刻也不能停止输入有关物质外部的及内部的诸多信息，并对这些信息进行鉴别和科学的加工。这就要求我们充分运用现代物理研究的手段和电子计算机。同时，还要运用唯物辩证的科学思维方法，处理好微观世界中局部与整体、精确与近似、动态与静态等诸方面的对立统一关系。并运用模型、非模型的方法提出假说，再经实践验证而上升为理论，然后再通过应用研究、发展研究而指导生产。

卢 嘉 锡

10. 量子化学的研究方法

量子化学建立以来，随着研究内容的不断深入和扩展，研究方法也逐步健全和提高。象价键法、分子轨道法、配位场理论方法等，都各有特点，其中分子轨道法又包括HMO方法、CNDO方法、Xa方法、从头计算方法等等，到目前为止，国内外学者已经总结积累了一套比较系统有效的研究方法。这里不想重述这些具体的专业性的研究方法，只想就量子化学发展中值得注意的几个带普遍性的思想方法问题，谈一点意见。

正确处理理论与实验的关系

众所周知，量子化学是搞理论的，它研究原子、分子和晶体的微观结构及其同宏观性能的关系，揭示化学反应的规律和催化作用的本质。但这种微观结构和化学反应的本

质规律，一般都很抽象，不易从感性直观获得，而要靠抽象的理论思维和严格的数学计算去探讨。因此，这就遇到一个方法论问题，即从事理论研究的量子化学如何正确处理和实验工作的关系。搞实验工作是不是离量子化学更远了？化学实验还是不是量子化学发展的直接源泉和动力？回答当然是肯定的。

马克思主义认识论告诉我们，实践与认识的关系是实践——认识——再实践——再认识，理论从实践中来，又在实践中得到检验和发展，正确的理论能够指导实践，这是认识论的普遍规律。作为人们认识原子、分子层次的结构和规律的量子化学，它的过去、现在和将来，一定会服从这个认识论的普遍规律。

量子化学的发展史表明，人类在二分之一个世纪的探索中，正是在实践、认识、再实践、再认识的多次反复中，获得了原子分子领域的基本理论知识。1924—1926年，量子力学产生以后，物理学家和化学家们就把它应用到化学上来，运用量子力学的原理和方法研究化学问题，于是产生了量子化学这门崭新的边缘学科。五十年来，它在化学实验的基础上，并和化学实验相互促进，得到了迅猛的发展，这集中表现在量子化学和结构化学以及合成化学的关系上。

大家知道，结构化学和合成化学主要是搞实验的。结构化学是运用各种实验仪器和方法测定分子、晶体的结构；合成化学则是通过各种方法和途径，合成具有特定性能的新材料、新物质。它们都为量子化学提供了许多新课题、新线索，积累了大量实验数据和经验材料。量子化学抓住这些新线索，研究这些新课题，分析综合这些实验数据和经验材料，就会向纵深发展，不断丰富自己的理论，扩大研究领域。反过来，量子化学的理论得到丰富和发展以后，又会武装结构化学、合成化学工作者的头脑，为他们提供理论根据，并指导结构化学和合成化学进行新的自觉的实验工作。量子化学五十多年的历程，就是这样实验——理论——新实验——新理论，循环往复，螺旋上升走过来的。可以这样说，若没有结构化学和合成化学，量子化学就得不到这样迅速的发展；反过来，若没有量子化学，结构化学和合成化学也不能象今天这样日新月异、成果累累。这充分说明了量子化学与结构化学、合成化学是相辅相成的辩证关系；结构化学、合成化学是量子化学的最直接的实验基础和推动力量，量子化学是结构化学、合成化学最重要的理论基础和指导思想。搞理论研究的同志应当和搞实验工作的同志密切合作。

现在，我们以三种化学键理论的发展为例，具体分析一下理论与实验到底是怎样相互依赖、相互推动的。在三十年代前后，量子化学依据当时的实验事实和理论水平，相继提出了三种化学键理论。所谓化学键，就是指分子中原子结合的方式和作用力；而研究回答分子中的原子如何结合，结合的作用力是什么的理论，就叫化学键理论。其中一种是价键理论，它是从经典化学键理论发展而来的，认为一个单键有两个电子在运动，双键有四个电子在运动，三键有六个电子在运动，其运动方式可以用量子化学方法计算出来，而且和实验结果符合较好。这种化学键理论简单直观，易于被人们所接受，从三十年代到五十年代，在大量实验推动下得到了丰富和发展，并且一直占上风。然而在五十年代以后，分子轨道理论就占绝对优势了。因为价键理论对解释一些非共轭分子如甲烷（CH_4）、氨（NH_3）等实验现象是成功的，但在解释共轭分子如苯分子结构（C_6H_6）等实验事实时就发生问题了。苯分子的六个碳原子六个氢原子，是个单键结合的骨架，在同一个平面上，另外有6个电子在骨架平面上下运动，六个电子不组成单

键、双键和三键，而是形成一个大π键，价键理论无法解释这个事实，而且，氧分子的活泼性和磁性等，价键理论也解释不了。这样，新的实验结果和新的问题就推动着人们接受并发展了分子轨道理论。分子轨道理论是从整体上考虑问题，认为电子运动是属于分子的整体，已不是哪个原子的电子了，因此解释了上述实验现象，克服了价键理论与新事实的矛盾，促使化学键理论大大向前跨进了一步。但是，科学的实验和认识是不会停止的，合成化学与结构化学的进一步实验又发现了新键型，如有的分子是立方体，有的分子象花篮，有的分子象夹心面包，等等，新的化学键类型丰富得很。这许多新键型的发现，又推动着化学键理论向前发展。特别是五十年代，化学家们合成了夹心型化合物二茂铁，这种物质上下都是有机分子，中间有一个金属原子夹在里边，好象个夹心面包。于是就提出一个新问题，金属是怎样成为夹心化合物而稳定存在的呢？无论是价键理论还是当时的分子轨道理论，都很难回答这个新问题，然而配位场理论就在这种新形势下迅速发展起来。配位场理论是研究中心原子、离子的性质及其与周围配位原子、分子的相互影响，从而对夹心型化合物或络合物，作了理论解释，并且和实验结果符合较好，因而使化学键理论又前进一步。这清楚地看出，三种化学键理论确实是在结构化学与合成化学提供的大量实验材料推动下，丰富和发展起来的，步步深入的实验工作是三种化学键理论的真正源泉和动力。

当然，化学键理论的发展也对实验工作产生了积极巨大的反作用。首先，它预言了许多化合物的存在。比如分子氮络合物，在以前好多年，依据化学键理论预测，就应当有这种类型的化合物，但是很长时间没有合成出来，一直到1965年，经过反复实验，终于合成出来了。一个分子氮络合物合成成功，接着又合成出许多种分子氮络合物，到现在已有几百个。它不仅证实了化学键理论的光辉预言，而且也给实验工作者自觉地应用化学键理论去寻找新的化合物指出了方向。其次，不管是无机化学家还是有机化学家，在研究工作中，都在自觉或不自觉地应用化学键理论，因为化学研究的对象——分子，实际有个图像，这个图象就是化学键理论提供的，只是自觉地应用，取得的成果就会更快更好，不自觉地应用，取得的成果就慢一些、差一些。所以化学键理论不论对哪种化学，都有普遍指导意义。另外，理论对实验的反作用，还表现在能指导人们去合成结构复杂，具有指定性能的新物质。如1965年建立分子轨道对称守恒原理以后，就应用这一原理出色地合成了维生素B_{12}，成为现代化学的一项划时代的成就。

总之，量子化学的发展说明，实验要有理论作基础和指导，理论要靠实验结果来丰富和发展，理论和实验相互促进，密切不可分割，这是辩证唯物论的认识论在量子化学学科中的具体表现。因此，搞理论研究的同志必须十分重视实验工作，对实验感兴趣，离开实验工作，理论就没有生命力；同时搞实验工作的同志应当重视理论研究，对理论研究感兴趣，离开理论的指导，实验工作就会陷入盲目被动状态。理论工作者和实验工作者要密切配合，配合得越好，越密切，科学发展就会越快，成果也越大。分子轨道对称守恒原理的提出，就充分说明了这一点。

大家知道，分子轨道对称守恒原理是量子化学中的一个重要原理，它是在1965年由伍德沃德和霍夫曼共同提出来的。伍德沃德是一位非常有名的有机化学家，很善于做实验，合成过许多有机分子，如喹咛等，特别是很多有机分子结构复杂，不易合成，而伍德沃德首先合成了。他对合成化学积累了相当丰富的实验材料和经验。霍夫曼则是一位

量子化学家，很善于搞理论工作，对量子化学有很深的造诣。他们两人共同合作，利用分子轨道对称性，对许多协同反应的机理和空间异构体进行科学分析和总结，在长期积累的许多有机化学反应的事实基础上，创造性地提出了分子轨道对称守恒原理，促使量子化学进人一个新阶段。这生动地说明了理论工作者和实验工作者密切合作的必要性和重要意义。

辩证地看待局部和整体的关系

量子化学研究的对象是分子，而分子是一个由原子、离子、核、电子等许多部分组成的体系。其中各个部分之间，结构错综复杂，相互作用多种多样，从而决定了物质分子具有丰富多彩的性能。因此，在我们探索分子结构和性能的关系，揭示化学反应的规律时，不能不遇到局部和整体的关系问题，这也是一个需要正确对待和处理的方法论问题。

唯物辩证法指出，自然界的任何现象和过程都有其整体和局部，它们是客观事物普遍联系的一种形式。整体和局部互相依赖、互相排斥，互相联系，又互相区别。整体由若干局部所组成，但并不是局部的简单相加和堆砌，而是由各个局部按一定方式组织起来的有机整体。所以，整体高于局部，统帅局部，整体的变化一定会引起各个局部的变化。而局部是整体的组成部分，隶属于整体，局部的情况如何，又会直接影响着整体。同时各个局部之间还有其相对独立性，它们的性质同整体并不完全一致，因而是有区别、有矛盾的。量子化学在研究分子结构与性能的关系过程中，经常要运用这种整体与局部的辩证规律处理问题。

大量实验表明，物质的分子有两类性质，一类性质可以看成是局部性质的总和，另一类性质则不能看成是局部性质的总和，而必须看成整体所具有才行。前者如结合能，就可以看成是局部能量的总和。这里分子的局部能量是指化学键，如甲烷有四个C—H键，许多有机分子也都有C—H键，而C—H是有机分子的局部东西，有机分子很多性质可以看成是这些键的性质的总和，而且从这个分子中的C—H键到那个分子中的C—H键，性质基本不怎么变动。因此，我们研究有机分子中的C—C键、C—H键、C—O键等等，把这些键的性质搞清楚了，就可以把这些键的性质加以综合，获得和掌握有机分子的整体性质。这说明了局部是按照一定方式组成整体，而整体是局部的总和，这是二者统一性的表现。由于有机分子非常复杂，如果能把整体性质看成各种键的性质的综合，就使得问题大大简化了，从而运用分析和综合的方法，搞清楚局部就可以把握它的整体了。

但是，分子的另一类性质是不能看作局部性质总和的，必须着眼于整体才行。比如光谱的一些性质，特别是电子跃迁，一个分子的电子从这个能级跳到那个能级，只有把这个电子看成是整体的一个电子，才能解释实验结果。又如，苯分子有六个π电子，不能把这六个电子看成苯分子的那个局部，而必须看成属于苯分子的整体，才能解释六个π电子的性质。这里明显反映了局部和整体的关系并不是简单相加的关系，而是量变引起了质变，各个局部综合成的整体，不同于各个局部之和，产生了新的性质和特点，这是局部和整体关系的又一个重要特点。

量子化学的上述事实，生动地说明了分子整体与其组成部分是对立统一的关系。一

方面整体由各个部分组成，整体的性质综合反映了局部的性质，这是二者的统一性，另一方面，整体虽由各个局部组成，但并不等于各局部之和，而是高于局部之和，这是二者的差异和矛盾性。所以，量子化学发展到今天，应当很好总结研究一下这些经验事实，正确认识和看待分子整体和局部的辩证关系，搞清哪些性质可以看成是局部性质之和，哪些性质不能看成是局部性质之和，从而为今后提供一种观察研究问题的科学方法。在本世纪四十年代，著名化学家鲍林曾作过这种总结工作，也取得相当大的进展，但现在面临量子化学的新事实和新飞跃，总结这个问题的重要性和迫切性更加突出了。

那么，如何正确处理整体和局部的辩证关系呢？科学研究的历史经验告诉我们，首先，必须把注意力集中在有关整体性的问题上，如果局部和整体发生了矛盾，为了研究整体的需要，暂时抛开某些局部性质的总和也是允许和应该的。量子化学中的近似方法就是建立在这个原则基础上的。例如有些复杂分子的性质，并不能完整精确的看成各个键的性质的总和，因为各个键之间还有联系，但这种联系居于次要地位，不起重要作用，为了简化问题，把握分子的主要性质，将各个键之间的相互作用暂时丢掉，采取近似结果，就可以把整体性质看成各个局部性质的总和了。当然，作为零级近似是局部之和，但要求高级近似，还要加一点东西，就是局部之间的相互作用。这种近似处理问题的方法，就是照顾全局、服从整体的方法。

其次，在强调研究起主要作用的整体性问题的同时，也不要忽视起次要作用的局部性质的研究。因为每个局部性质都是整体的一个组成部分，都对整体有一定的作用，都能够在自己的位置和序列上影响整体。比如，分子中许多原子相互作用，其中相邻原子之间的相互作用是主要的，是构成化学键的基本部分，而非相邻的原子之间也有次要的相互作用，如诱导作用，空间阻碍作用等等，这些次要作用也在一定程度上以各种方式影响分子的化学性质。所以研究分子的性质，应当考虑到各种相互作用的一切影响，这样才能避免片面性，全面客观地反映分子的真实面貌。但事实上，对于某些结构极其复杂的分子，要把握它的一切内外因素是不可能的，只要求尽可能的全面一些就是了。

第三，抓住重点，正确处理局部和局部的关系。因为，构成整体的各个局部之间不是彼此并列的，它们的地位和作用，有主次、轻重、先后、缓急的区别。重点是决定整体的关键，所以，观察研究任何化学现象和过程，都要把注意的重心，放在那些对整体最重要最有决定意义的问题或环节上。

在这里应当指出，价键理论和分子轨道理论对待整体和局部的关系上都有一定的片面性。价键理论着眼于价电子的成对，比较注重局部，有所忽视整体；而分子轨道理论则强调电子属于分子的整体，比较注重从整体看问题，而有所忽视局部，两者各有自己的长处和不足。因此，我们应当依据整体与局部的辩证关系，综合价键理论和分子轨道理论的优长，克服二者的不足，采用先进的计算方法，逐步建立一种比较全面的化学键理论，使之既可以从较高的角度、较远的距离来反映分子的整体（如分子轨道理论），又可以从较近的角度来说明成键的情况（如价键理论），以便形成我们自己的化学键理论的特点。

进一步研究静态和动态的关系

探索分子的结构与性能固然重要，但更重要的还在于研究化学反应的规律。因为只

有通过化学反应，才能达到利用自然、改造自然，并为人类服务的目的。而研究化学反应的规律，就要了解和掌握反应前物质的性质和状态，即所谓“静态”；反应变化的方向、途径和性质，即所谓“动态”；以及反应后生成物的性质与状态，又是“静态”。这个静态——动态——静态的转化过程，实质是个静态与动态的关系问题，如何调整好这个关系，如何揭示动态过程的本质和规律，也是一个值得注意的方法论问题。

尽人皆知，运动是物质的根本属性，自然界的一切物质形态都处于永不停息的运动变化中，这是物质运动的绝对性。化学反应的进行，物质形态和能量的转化，正是这种绝对运动的一种表现。但同时，在永恒的、绝对的物质运动中又包含着各种各样的相对的静止状态，自然事物在它发展的一定阶段和一定时期内，具有质的稳定性，这又是事物静止的相对性，化学反应前后物质形态和性质的确定不变，正是这种相对静止的一种表现。应当指出，事物的运动状态和静止状态不是彼此孤立的，中间没有不可逾越的鸿沟，实质上静止状态只是运动状态的一种特殊表现形式，是事物的运动发展还没有使它变为另一事物以前的一种运动形式。就拿化学反应前后物质的稳定性来说，只是相对的、暂时的，处于量变阶段而已，并且也不妨碍组成这一物质分子的原子、离子、电子等剧烈运动，更不影响它参与其它物体或天体的运动。所以，运动和静止是对立统一的辩证关系，二者互相区别、互相排斥、又互相依存、互相转化，正是这种又矛盾又统一的辩证规律，决定了化学运动中静态和动态的复杂关系。

实验事实告诉我们，有许多化学反应的动态性质可以从始态和终态的静态性质推导出来，这是静态和动态存在统一性的一种具体表现。比如，在热力学中，如果一个变化过程，知道两个平衡态，就可以根据热力学第一和第二定律判断这个变化过程往哪个方向进行，即由静态性质决定动态性质，指明运动变化的方向。在量子化学中，探讨化学反应动力学的规律，几乎都是由静态来决定动态性质的，在研究反应的化学活性问题时，比如萘分子中有α、β两个位置，究竟那一个位置容易起反应呢？又如苯环分子和其他基团起反应，当第一个基团上去以后，第二个基团进来时，到苯环上的何种位置呢？这里有三种情况，即邻位、间位、对位，究竟到那个位置上去，需要从理论上作出回答，这也是要由分子或基团的静态性质来决定化学反应的活泼性。本世纪四十到五十年代做了大量工作，用量子化学计算电子云密度，知道α位置电子云密度大，带的是负电，所以带正电的东西易到α位置上去，迅速起反应。这就由电荷密度、正负电性等静态性质判定了动态反应的化学活性。此外，分子轨道对称守恒原理表明，在有些类型的化学反应中，分子轨道对称性质是不变的。这样，在化工生产和科学实验中，只要知道其中化学反应的始态和终态，就可以判断怎样变过去的；如果有两种途径，我们也可以判断走哪一种途径。这又是由静态性质决定动态性质的一大成就。量子化学以往在这一方面做了大量工作，并获得了许多有意义的成果，这充分说明动态和静态不是彼此隔绝，绝对孤立的，而是有着内在的统一性。

但是，很多实验也表明，许多化学反应的动态性质单靠静态性质是决定不了的。如有一类反应，你从始态和终态的静态性质推知化学反应过程的性质推不出来，并显现出一些新性质和新特点，这说明化学物质的动态和静态又有差别和矛盾，不能把它们的统一性绝对化。因为，有些物质的结构形式、能量转化、信息传递等，在化学反应过程中错综复杂、变换多样，表现出某些特殊规律，是毫不奇怪的，怎么能由静态性质完全无

遗的决定动态性质呢？应当指出，量子化学发展五十年，动态研究的少，静态研究的多，这是一个弱点，切不可认为只要研究静态就够了。以上说明在探索化学反应规律的过程中，有些化学反应的动态性质可以由静态性质判断出来，而有些化学反应的动态性质则不能由静态性质决定下来，还有其特殊性。这是绝对的运动状态和相对的静止状态对立统一关系的一个具体反映。量子化学今后的发展，应当进一步探究这种动态和静态的深刻的辩证关系，分析哪些动态性质可以由静态性质决定，哪些动态性质不能由静态性质决定，我们应该如何去得到，以便自觉的积极地把主要精力转移到研究动态性质上来。这是一个带战略意义的问题。

应用近似方法要抓准主要矛盾

量子化学所研究的对象是许多微观粒子构成的体系，其中大量是多体问题。因此在探索其结构、性能与反应规律的过程中，要严格的进行定量的计算是很困难的。比如按照从头计算方法计算分子结构，若有100个电子，就要计算一亿个积分，而且计算起来相当麻烦。甚至有些问题，在高速电子计算机上计算也极不容易。因此，对量子化学来说大量主要的是采用近似方法。既然要近似的处理问题，就要丢掉一些次要因素，抓住一些主要东西。所以善于区分和处理主要矛盾和次要矛盾，就成为量子化学方法论的一个重要方面了。

提到抓主要矛盾，似乎是老生常谈了，但口头上谈论这个方法是一回事，在专业研究中能否灵活运用这个方法又是另一回事。大家知道，在一个复杂的事物或过程中常常存在许多矛盾，在这些矛盾中必有一种起着主导的决定的作用，即所谓主要矛盾。因此，解决任何问题都要求抓住主要矛盾，抓住对事物的全局起决定作用的关键环节，这是普遍有效的方法。但问题在于怎样认清主要矛盾和次要矛盾？抓住的是不是主要矛盾？丢掉的是不是次要矛盾？这就需要运用辩证的思维进行科学分析了。一般说来，要抓准主要矛盾，必须具体分析各种矛盾的特点及其相互关系，加以比较，看它们在事物发展过程中各占何等地位，各起什么作用，从中找出起领导和决定作用的就是主要矛盾。而且要随时注意在不同条件和阶段上，主要矛盾和次要矛盾的转化。这在量子化学发展史上是有不少经验和教训的。

我们都知道，分子中有许多原子核和电子，它们都在运动，情况十分复杂。但核与电子有很大区别，核的质量比电子质量大很多倍，如氢原子核比电子重1840倍，其他原子核更重，有的比电子重万倍或几十万倍。由于这种质量的差别，就使得运动产生了很大差别，电子运动得很快，核运动得很慢，而且两种运动之间还有相互作用。在这种情况下，电子的运动、核的运动显然是影响分子性质的主要因素，而核运动与电子运动的相互作用则是次要因素。因此，可以把核的运动和电子运动分开来处理，核有核的运动，电子有电子的运动，分别看待。这就是量子化学早期提出来的玻恩—奥坡海默近似。玻恩、奥坡海默两个人，分析了原子核与电子的区别，把核运动与电子运动分开来处理，抓住了主要矛盾，而丢掉了核运动与电子运动相互作用这个次要矛盾，引进一种近似方法，从而发展了分子光谱学。事实上，整个光谱学理论是建立在玻恩—奥坡海默近似基础上的。按照这种近似理论，电子运动部分就是电子光谱，核的运动部分就是分子振动光谱、分子转动光谱，而且理论计算结果与实验事实符合得相当好，误差比十万

分之一还小。这充分说明实践是检验真理的标准，也说明了玻恩、奥玻海默抓住的是主要矛盾，丢掉的是次要矛盾。它在量子化学发展史上是一个善于抓住主要矛盾，并集中力量解决主要矛盾的典型事例。

当然，有成功的经验，也有失败的教训。在处理多体问题上，托马斯—费米不分主次轻重，一律采用统计平均方法而遭到的失败，就是一例。如上所述，研究分子的结构问题，实质上是个多体问题，而多体是可以用统计平均结果来处理的。但著名科学家托马斯、费米，在这个问题上没有抓住主要矛盾，把电子运动的动能、库仑作用能和交换作用能都用统计平均办法进行计算，得到的结果对原子还可以，对分子完全不行。要用这种统计平均办法来计算，原子只能是孤立的原子，都不能结合成稳定的分子，而实际情况并非如此。这就说明，托马斯—费米的处理办法，零级近似办法，丢掉了主要矛盾，抓住的是次要矛盾，所以结果对分子完全不适用。到了1951年，另一位物理学家斯雷特，把动能部分、库仑作用能部分作为主要矛盾，按照量子力学来处理，而交换作用能部分作为次要矛盾用统计平均办法处理，得到的结果很成功，很好，后来又发展成为X 方法。

上述经验和教训表明，搞科学研究，向大自然进军，抓住了主要矛盾，丢掉或适当处理次要矛盾，科学研究就能胜利，结果就成功，就能推动科学向前发展，抓不准主要矛盾，或不分主次，“眉毛胡子一把抓”，科学研究就走弯路，结果就失败，就阻碍科学的发展。特别是对量子化学来说，主要是用近似方法，更要注意这个问题。其它学科，如果要建立或采用某种近似方法，这种近似方法能否站得住脚，也一定要抓准主要矛盾，正确处理或丢掉次要矛盾，方能得到成功的结果，达到预期的目的。因此，对于我们科学工作者来说，善于抓住主要矛盾和集中力量解决主要矛盾，实在是进行科学研究的一项基本功。

正确处理不同运动形态的关系

按照运动形态分类，量子化学是研究化学运动形态的科学，但所使用的原理和方法又是量子力学提供的，即研究物理运动形态的原理和方法。因此，在这里化学运动形态与物理运动形态，也就是高级运动形态同低级运动形态的关系问题，显得特别突出。所以正确认识和处理这种关系，又是量子化学方法论的一个重要问题。

辩证唯物论的运动观告诉我们，自然界存在着多种多样的运动形态，如机械的、物理的、化学的、生物的等等，这些不同质的运动形态有高级低级之分，并相互交错，依一定条件互相转化。例如，生物运动形态比化学运动形态高级，而化学运动形态又比物理运动形态高级。事实证明，高级运动形态包含着低级运动形态，但高级运动形态不能归结为低级运动形态，因为它们既有统一性，又有不同的本质特点。所以，我们观察处理不同学科所研究的不同运动形态的关系，一定要注意这种密切联系和本质区别。在这个问题上要反对两种倾向，一种倾向是研究高级运动形态时，认为只要研究低级运动形态就够了。比如把化学运用物理学的研究方法，误认为化学运动形态就是物理运动形态，抹杀了高级运动形态与低级运动形态的本质区别，这叫做“还原论”。事实上，把高级运动形态还原到低级运动形态，是还原不了的，因此要反对“还原论”。另一种倾向是乱扣“还原论”的帽了，否认高级运动形态与低级运动形态的辩证联系，把高级运动形态独特化、神秘化，它可以叫“独特论”。这种“独特论”反对用物理、化学的方法研究生物

学，动不动就给扣上"还原论"的大帽子，对科学的发展十分有害，也是必须批判的错误倾向。这两种倾向在量子化学的发展中都出现过。

大约在1928年左右，量子力学建立不久，一位大物理学家狄拉克说过这样一段话：量子力学规律得到以后，使得物理学大部分规律，化学中全部规律都已掌握了。并认为化学问题，原子、分子的运动规律，只要应用量子力学规律，都能解决了。当时，由于狄拉克是一位大物理学家，在国际上很有影响，所以许多理论物理学家、理论化学家都赞成他的看法，认为化学理论问题解决了，只要解决计算问题就可以了。这可以说是量子化学早期出现的"还原论"。绝大多数化学工作者都不赞成这个提法，笔者本人也反对这种提法。因为，今天的量子力学是不是把原子、分子这个层次的运动规律全部掌握了呢？不见得。经验证明，要研究客观物质运动，把一个层次的规律全部掌握的话，必须到下一个层次的运动规律搞清楚以后，才能说对这个层次的运动规律真正掌握了。如机械运动，原来牛顿力学是描写宏观物体机械运动规律的，到了相对论出来之后，我们对牛顿力学才有更深刻的理解，即物体运动速度比光速小得多时，牛顿力学是适用的，但接近光速时，牛顿力学就不适用了，要用相对论力学。我们相信，到了基本粒子层次的规律掌握之后，对原子、分子领域的运动规律，也就是量子力学规律，又会有更深刻的认识。所以我们说，对一个层次的运动规律是否完全掌握，必须到下一个层次运动规律搞清楚了，回过头来看才能肯定。例如对电子服从泡利不相容原理，我们还是知其然不知其所以然。为什么的问题，只能到电子结构搞清楚了，回过来看，才会了解原来描写电子运动的状态函数要反对称。所以我们认为，今天量子力学的规律起了很大作用，然而却不能说今天的量子力学规律，已经把原子、分子这个层次的规律全部掌握了。我们认为，狄拉克的说法有两点不对，一点他把化学的运动形态完全还原为物理运动形态，是个真正的"还原论"；另一点是认为原子、分子这个层次的运动规律全部已经掌握了，实际上也不见得。相对论用到原子、分子的运动规律上来，狄拉克提出了相对论方程，但多电子相对论方程到目前还没有么！所以狄拉克的说法是很武断的，许多搞理论的与搞实验的化学工作者，都不赞成这种提法。

但是，我们在反对"还原论"的同时，也必须反对"独特论"。大家都知道，运用现代物理、化学的方法在分子水平上研究生物学，是当代科学的重大成就之一。"独特论"认为，生物运动是高级运动形态，运用物理、化学方法研究生物运动，就是把高级运动形态还原为低级运动形态；并且片面强调生命是一个独特的整体，不能进行物理、化学分析，等等。我们认为，高级运动形态与低级运动形态具有质的区别，但二者又互相渗透，有着密切联系。为了弄清高级复杂的运动形态的本质和规律，应当首先而且尽量用低级简单运动形态的原理和方法进行研究，这是客观物质运动本身的逻辑和人们认识的正常秩序所要求的。恩格斯曾经指出："研究运动的性质，当然应当从这种运动的最低级、最简单的形式开始，然后才能对更高级的和更复杂的形式有所阐明。""只有这些关于统治着非生物界的运动形式的不同的知识部门达到高度的发展以后，才能有效的阐明各种显示生命过程的运动进程。对这些运动进程阐明，是随着力学、物理学和化学的进步而前进的。"[①]恩格斯的这些论断是多么深刻有力。事实上，只有最大限度的

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，53页。

运用低级运动形态的规律和方法来研究高级运动形态，才能在实践中发现低级运动形态的规律和方法的不足之处，而这种不足之处恰恰反映了高级运动形态的新性质和新特点，从而引导人们去揭示新的发展规律。我们应当积极提倡运用现代物理学、化学的原理和方法研究生物运动，既要对生物微观结构进行分析，又要对生物整体进行综合考察，以便彻底搞清生命运动的本质和规律。

总之，我们在量子化学的研究中，对待高级运动形态和低级运动形态的关系，要反对两种倾向，一是真正的"还原论"，一是乱扣还原论帽子的"独特论"。它们都歪曲和破坏了高级运动形态和低级运动形态的辩证关系，不利于科学的发展。

综上所述，理论与实验的关系，局部与整体的关系，动态和静态的关系，主要矛盾和次要矛盾的关系，以及高级运动形态和低级运动形态的关系，是量子化学发展中非常重要的五个关系，而且其它学科也存在这五个关系问题，因此，如何处理好这五个关系问题，有着普遍的方法论意义。我们量子化学工作者应当努力学习、自觉运用马克思主义自然辩证法，按照客观事物本来的辩证性质和人们的认识规律，深入进行科学研究，正确地认识和合理的解决上述五个关系问题，促进量子化学更快的发展，夺取新的更大的成果。

唐 敖 庆

11. 化学热力学中的演绎法

十九世纪中叶以后，物理学的理论、方法和实验手段，逐渐向化学领域移植和渗透，出现了物理化学这一门边缘学科。其中化学热力学就是首先在十九世纪七十至八十年代开始形成的。化学热力学中应用的科学方法丰富多彩，种类繁多，但是，其基本方法是演绎法。这个方法的核心在于把三个热力学基本定律作为公理，将它们应用于各种热力学体系中的化学反应和相变等过程，通过严密的逻辑推理，得出许多必然性的结论。下面就化学热力学中的演绎法的特点和规律作一初步的探讨。

演绎推理是前提与结论之间具有必然联系的推理，是从一般到个别的推理。在形式逻辑中，演绎推理的客观基础，在于客观事物之间具有类属关系。凡一类事物具有某种属性，则该类事物中的每个事物也必然具有某种属性；凡一类事物不具有某种属性，则该类事物中的每个事物也必然不具有某种属性。这是类属关系的基本公理。热力学所研究的能量转化的一般规律，和化学所研究的化学反应、相转变等过程中的能量转化的特殊规律之间，就存在这种类属关系。我们知道，热力学是一门研究能量转化及与能量转化有关的物性（或物理量）间的相互关系的科学①。它研究各种形式的能量转化的一般规律。由于在所有的化学反应和相转变过程中，在发生物质化学变化和相转变的同时，都伴随有能量转化，所以化学也要研究化学变化、相转变等过程中能量转化的规律。这样，热力学和化学在研究能量转化规律及与能量转化有关的物理量间的相互关系方面，就存在着类属关系。

我们还必须看到，化学反应和相变过程表现出非常复杂的多样性。所以，热力学规

① K.Wark, *Thermodynamics*, 3rd ed., p.1 (1977).

律的一般与化学反应和相变过程中能量转化规律的个别之间存在着深刻的辩证关系，它超出了形式逻辑的范围，是辩证逻辑的一般和个别的关系。我们必须以辩证逻辑为指导，看到同一中的差别，看到演绎和归纳的相互结合、补充，这样，才能正确分析和总结化学热力学的演绎法。

化学热力学演绎体系的基础

化学热力学的理论逻辑结构，可分为具有内在联系的两部分。第一部分是由逻辑上各自独立的基本概念和三个基本定律，它们组成了化学热力学理论体系的基础即热力学公理化体系。这一部分是全部逻辑演绎的出发点，是决定理论性质和发展方向的部分，虽然它在整个理论体系中仅占较少分量。第二部分是上述热力学公理化体系向化学反应和相变等过程的逻辑演绎，并得出相应的必然性结论。这一部分内容丰富，分量很大，但在整个理论体系中从属于基础部分。

一般认为，热力学三定律是对人类经验和科学实验进行归纳和总结的结果，这在总体上说是正确的。但是，从科学认识的方法论深入考察时，可以看出，在这些定律的建立过程中，既有由个别到一般，又有由一般到个别，而以个别到一般为主。这就是说，在以归纳结构为主的方法中，渗透着、融合着演绎的方法，演绎起着补充归纳的作用。

热力学第一定律涉及内能、热量和功相互转化的关系，能量守恒和转化定律是在它的基础上进一步归纳和推广的结果。恩格斯曾经精辟地把这个认识过程概括为由个别到特殊再到一般的三个阶段①。十分明显，在这个认识过程中必然涉及归纳的目的和方向问题，如为什么要总结经验事实和进行科学实验？怎样去总结经验事实和进行科学实验等。因此，为了从个别和特殊中概括出一般原理，还必须依据一般原理，在应用以归纳为主的方法时，还必须补充和结合使用演绎的方法，甚至还离不开哲学的指导。例如，焦耳在长期从事热功转换实验的过程中，已坚信热功等当并自觉地以这个概念指导自己的工作。又例如，迈尔在1842年发表关于热力学第一定律的论文的指导思想是："果必有因，因必有果，因与果是等当的。"②

热力学第二定律是关于热力学过程方向性和平衡的判据的定律。通常认为，它也是从人类的生产和生活实践中归纳总结出来的。人们在长期实践中，认识到热量可自发地从高温物体流向低温物体，铁在潮湿空气中能自动地生锈等等，而这些过程的逆过程都不会自动发生。于是人们归纳出：热力学系统中的一切自发过程都是不可逆的。但是，科学史表明，热力学第二定律并不是这样单纯依靠归纳建立起来的。在热力学第二定律的建立过程中，起了重大作用的是卡诺对热机的工作原理和效率的研究，如恩格斯所指出的，卡诺"研究了蒸汽机，分析了它，发现蒸汽机中的基本过程并不是以纯粹的形式出现，而是被各种各样的次要过程掩盖住了，于是他撇开了这些对主要过程无关重要的次要情况而设计了一部理想的蒸汽机"③，他由此发现了著名的卡诺原理：工作于两个一定温度热源之间的所有热机，其效率都不会超过可逆热机。显然，在卡诺的工作中没有用归纳法，而主要用了分析法，在分析中又包含了严格的演绎推理。卡诺原理提出以

---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，202—203页。

② 王竹溪：《热力学教程》，6页。

③ 同①，207页。

后，当时有不少人认为它与能量守恒定律是矛盾的，后者证明功可以完全转变为热，而前者则说明热不能完全转变为功，他们因此怀疑卡诺原理的正确性。后来又经过一些学者的工作，终于在1850年，克劳修斯弄清了能量守恒在卡诺原理中的意义，发现了热力学第二定律。克劳修斯看到了热力学第一、二定律的同一性和差异性，将这两个定律加以综合，于1854年提出熵函数的概念，建立起热力学第二定律的数学形式，并由此推出一切热力学过程的方向和限度的科学判断。综上所述，热力学第二定律的建立，绝不是单纯依靠归纳法，它是归纳和演绎、分析和综合相结合的结果。

在十九世纪五十至六十年代，虽然热力学一、二定律已经确立了，但不能用来具体解决化学反应和相转变的方向、限度等问题，这不仅因为那时一些热力学概念还较模糊，而且因为熵判据的直接应用要以绝热过程或孤立体系为条件，在实际运用上受到了很大的限制。为此，在内能（U）和熵（S）这两个基本的热力学状态函数之外，又引进了补充的状态函数焓（H）、功函（F）和自由能（G）。对于热力学过程中这些状态函数的变化，由热力学第一、二定律可推导出以下四个微分过程式：

$$dU = TdS - PdV, \quad dH = TdS + VdP,$$

$$dF = -SdT - PdV, \quad dG = -SdT + VdP$$

有了这些关系式，就能够对几种常见条件下实际过程的方向和限度进行判断。显然，上述几个补充状态函数和关系式也不是仅仅依靠归纳方法得出的。

热力学基本概念、三个热力学定律和上述各数学关系式，组成了热力学理论体系的基础，它们是化学热力学逻辑演绎的出发点。

化学热力学逻辑演绎的主要内容

化学热力学的内容主要是将上述热力学基本原理应用于化学反应和相变过程等，推导出许多命题和结论。在这一认识过程中，既有由一般到个别，又有由个别到一般，而以一般到个别为主。因此，其中既用了演绎法，又用了归纳法，而以演绎法为主。爱因斯坦曾对现代科学理论中的演绎过程作过精辟的分析，他指出，从公理引向经验事实或可证实的结论的思路，………愈来愈长，愈来愈微妙。由于化学反应和相变等过程的多样性和复杂性，在化学热力学中演绎的内容面广，分支繁多，过程复杂。仅就物理化学中的有关内容而言，大致可分成以下互相联系的几个部分：

（1）热力学第一定律向热化学的演绎

首先，从热力学第一定律演绎出反应热效应总值一定定律（即盖斯定律）。从盖斯定律进一步演绎得到种种间接推算热效应的方法。其次，从热力学第一定律可演绎出基尔霍夫定律，以及对于非等温反应求热效应或终态温度的方法。

（2）热力学第一、二定律向多组分和组成可变体系演绎的基础工作

一切发生化学反应的体系和多数发生相变的体系，都是多组分和组成可变的体系。热力学第一、二定律向多组分体系中发生的过程演绎时，必须先作以下两方面的基础工作：第一，对实际多组分体系进行分析，抽象出化学势概念。从基本公式 $dG = -SdT + VdP$ 出发，结合化学势（μ_i）概念，演绎出关系式 $\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial T}\right)_{P,n_i,n_j} = -\overline{S}_i$ 和 $\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial P}\right)_{T,n_i,n_j} = \overline{V}_i$；再将后者与气体状态方程式结合，导出理想气体和非理想气体的化学势公式。比较这两个化学势公式引出逸度概念。第二，将热力学基本公式 $dU = TdS$

$-Pdv$等扩展到多组分和组分可变体系，得出$dU=Tds-Pdv+\sum_i \mu_i dn_i$等四个基本公式。然后，将公式$dG=-SdT+vdP+\sum_i \mu_i dn_i$与从热力学第一、二定律联合式导出的等温等压（不作非体积功条件下的）重要公式$dG\leq 0$结合，即演绎出在上述条件下判断组成可变体系自发变化方向和限度的基本公式$\sum_i \mu_i dn_i\leq 0$。

（3）热力学第一、二定律向相变和相平衡的演绎

将公式$\sum_i \mu_i dn_i\leq 0$应用于等温等压下的微小相变过程，即可演绎出关于相变和相平衡的基本公式$\mu_i^\beta\leq \mu_i^\alpha$。从相平衡条件$\mu_i^\beta=\mu_i^\alpha$出发，通过演绎，可得到十分丰富的结果。例如，它与经验定律拉乌尔定律和亨利定律结合，并应用理想气体化学势公式，即可导出稀溶液中溶剂和溶质的化学势公式；将它应用于理想溶液的气液两相平衡，即可导出理想溶液中组分的化学势公式。后者通过比较和修正，即引出非理想溶液中溶剂和溶质的化学势公式及活度的概念。在对多组分复相体系的独立组分数、变量总数等进行分析的基础上，应用相平衡条件和上述各种化学势公式，即可导出相律。

（4）热力学定律向化学反应和化学平衡的演绎

将公式$\sum_i \mu_i dn_i\leq 0$应用于等温等压下不作非体积功条件下的微小化学反应，即可演绎得公式$(\sum_i \nu_i \mu_i)_{生成物}-(\sum_i \nu_i \mu_i)_{反应物}\leq 0$，这是化学反应自发进行方向和限度（化学平衡）的判据。将各组分的化学势公式代入此式，即得到化学反应等温方程式。应用此式，从标准生成自由能数据，可计算出标准状态下反应自由能的变化ΔG°、平衡常数Ka和转化率。另一方面，将从基本公式$dG=-SdT+VdP$导出的吉布斯—赫尔姆霍茨方程式与公式$\Delta G=-RT\ln Ka$结合，可导出公式$\left(\frac{\partial \ln Ka}{\partial T}\right)_P=\frac{\Delta H^\circ}{RT^2}$，它可用于从某一温度下反应的Ka求算其它温度下的Ka值。为了寻求只用热化学的方法（不用任一已知的Ka）计算在任意温度下的Ka的方法。二十世纪初，人们通过多年的实验、分析、假说和验证，建立了热力学第三定律。由此出发，即可只根据量热数据算出各物质在不同温度下的熵值（绝对熵），从而依次算出化学反应的ΔS°、ΔG°和Ka。

化学热力学演绎过程的特点

由于化学热力学理论体系庞大，内容丰富，因此，其演绎过程具有下面一些特点：

（1）化学热力学属于"原理理论"，具有巩固的实践基础和完整的逻辑结构。爱因斯坦认为，物理理论可分为不同种类。一类称为"构造性理论"，它是从比较简单的形式体系即假说出发，对各种比较复杂的现象和过程构造出图像，加以说明。如气体分子运动论就属于这一类。另一类称为"原理理论"，它不是从假说出发，而是从大量的经验出发，从中发现自然过程的少数普遍特征，即原理。这些少数原理形成这一理论的基础和出发点，由此可演绎出一系列其它命题和结论。热力学和化学热力学就属于这一类。这两类理论都同样具有高度的抽象性、简单性、科学性和普遍性。爱因斯坦指出："构造性理论的优点是完备、有适应性和明确；原理理论的优点则是逻辑上完整和基础巩固。"①

---

① 《爱因斯坦文集》，第一卷，商务印书馆，1977年，110页。

（2）热力学普遍规律与具体体系或过程的性质相结合，共性与个性相结合。

化学反应和相变过程等的方向、限度的判据，不可能由热力学关系式直接推论而得。必须立足于化学反应或相变过程等的个性，把热力学定律的共性和这些过程的个性辩证地、有机地结合起来，对物理量之间的关系式进行改造、制作和创新，才能具体解决这些过程的方向和限度的判据问题。例如，从热力学原理向多组分体系的演绎来看，首先，将$dU = TdS - PdV$等四个基本公式扩展为$dU = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dn_i$等四个公式，后者开辟了热力学定律向多组分体系演绎的渠道。但是，这一步骤不是单纯地依靠演绎实现的，其中包含了对实际多组分体系的实验、分析和归纳。由此形成了化学势的新概念之后，再结合应用数学工具才能完成上述公式的改造和创新工作。化学势是多组分和组成可变体系所特有的范畴，它不能由热力学定律自身演绎出来。进一步看，多组分体系的基本判别式$\sum_i \mu_i dn_i \leq 0$，还必须与相变过程自身的特点$dn_i^\alpha = -dn_i^\beta$相结合，才能演绎出相变的方向和相平衡的判别式$\mu_i^\alpha \leq \mu_i^\beta$，还必须与化学反应自身的特点（反应中各物质的变化量受反应式的限制，与它们的系数成正比）相结合，才能演绎出化学反应方向和化学平衡的判别式$(\sum \nu_i \mu_i)_{产生物} - (\sum_i \nu_i \mu_i)_{反应物} \leq 0$等等。总之，在热力学演绎中，处处表现出共性与个性相结合的特点。正由于这一特点，在演绎为主的方法中必须渗透、结合着归纳和分析的方法。

（3）演绎过程和体系结构具有鲜明的层次性。

首先，由热力学定律出发，对热化学、相平衡、化学平衡等各个领域分别演绎出若干特殊的规律，然后，再将这些特殊规律应用于各种具体体系或过程，进一步演绎出更多的个别性的规律。因此，整个演绎过程表现出鲜明的层次性。其次，对每一个具体层次的规律而言，它都是普遍性和特殊性的辩证统一体，在一种场合下属普遍性，在另一种场合下则属特殊性，因此，其普遍性或特殊性仅有相对的意义。例如，对于多组分和组分可变体系

$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dn_i$$

是普遍规律，从它和$dG \leq 0$导出的判别式$\sum_i \mu_i dn_i \leq 0$只能运用于等温等压不作非体积功条件的范围，所以，这个公式是个特殊的规律。但是，就大量常见的化学反应和相变过程而言，都可在等温不作非体积功的条件下进行，在这个范围内来说，$\sum_i \mu_i dn_i \leq 0$可算作一个普遍规律。从它演绎出的公式$\mu_i^\alpha \leq \mu_i^\beta$是只适用于上述条件下相变过程的特殊规律。但是，就相平衡条件$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta$来说，它又是适用于一切相平衡体系的普遍规律，从它导出的各种溶液组分的各个化学势公式、相律、分配定律、稀溶液凝固点降低公式和沸点升高公式等等，则是更为特殊的规律了。

（4）演绎中经常运用比较法。

比较方法，是平衡态热力学方法上的一个特点。我们知道，平衡态热力学不考虑时间因素，不研究过程的速度，而主要研究状态变量由始态到终态(都是平衡态)的改变值。这种改变值与过程的途径无关。这就为化学热力学中各种比较方法奠定了客观的基础。化学热力学中常见的比较方法有三种。

前后相继的事物之间的比较。这是将一个状态函数在始态和终态的数值进行比较。

例如，公式$\mu_i^{\alpha} \le \mu_i^{\beta}$是将相变过程的始态和终态的化学势进行比较，公式

$$\left(\sum_i \nu_i \mu_i\right)_{产生物} - \left(\sum_i \nu_i \mu_i\right)_{反应物} \le 0$$

是将化学反应的始态和终态的“总化学势”进行比较。

并存事物之间的比较。这是将同始态同终态的两个不同途径进行比较。例如，热化学中一切公式、方法的根据，都是因为同始态同终态的不同途径具有相同的ΔH（或ΔU），由此出发来具体进行计算的。根据类似的原理，在计算不可逆过程的ΔS、ΔF或ΔG时，先在该过程的始终态间设计一可逆过程，并计算此可逆过程的ΔS、ΔF或ΔG。

实际事物与其理想模型进行比较。例如，将实际气体与理想气体的性质进行比较，在理想气体的公式中加一修正系数，使公式适用于实际气体，同时通过比较建立起逸度和逸度系数概念。将实际过程与理想的可逆过程进行比较也具有这一种比较的性质。

(5)在演绎中理想化方法有重要作用。

首先，理想化方法是建立热力学理论体系的一个必不可少的方法。如热力学中的孤立系统、可逆过程等基本概念，都是理想模型，卡诺循环等则是理想实验。没有这些理想模型和理想实验，热力学理论体系是建立不起来的。其次，理想化方法是演绎法在逻辑上的必要的补充。在化学热力学演绎体系中，首先是将热力学定律和原理应用于各种热力学体系和过程的理想模型（如理想气体、理想溶液、等温可逆过程、绝热可逆过程等），进行演绎推理，得出许多重要结论。运用理想化方法设计出的一系列理想模型和理想实验，保证了热力学演绎推理的简单易行和目的明确。再次，理想化方法是热力学原理向实际体系和实际过程演绎的桥梁或纽带。由于热力学基本原理一般不能直接应用于各种实际体系和过程，必须先建立它们的思想模型，将热力学原理用于这些模型，演绎出比较简单的关系式，然后对照实际体系和过程的特征，将模型的这些关系式加以适当修正，就可得出实际体系和过程的近似规律。例如，将理想气体状态方程式加以适当修正，就得到比较符合实际气体行为的状态方程式；将理想溶液中组分的化学势公式适当修正，引人活度系数，就得到实际溶液中组分的化学势公式等。这是化学热力学中广泛采用的一种重要方法。因此，可以说，如果没有理想化方法，就不可能实现热力学的逻辑演绎。

(6)数学方法是热力学演绎法的重要手段和工具。

在热力学理论体系中，各个物理量都用函数表示，各个定律都用方程式或不等式表示，因此，热力学演绎体系基本上自始至终贯穿了数学演绎法。由于在平衡态热力学中不考虑时间因素，所以不存在含时间的运动方程，在这里主要考虑始终态间状态函数的改变值。状态函数是多元函数，所以，采用了以多元函数微分为主要数学工具的热力学函数演绎法。化学热力学理论体系是化学中第一个演绎体系，它的建立，结束了数学在化学中的应用“是最简单的一次方程式”① 那样的历史阶段。

最后，还需指出，现有的化学热力学的理论体系，是研究大数量原子、分子的集合体的宏观性质，而不涉及物质的微观结构和反应的机理，从而也不能反映宏观性质和微

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，249页。

观性质之间的关系。因此，这种方法有其局限性，需要用统计力学方法加以补充。

热力学演绎法对化学的重大作用

科学理论的抽象性程度越高，其普适性就越强，其可运用的范围就越广。任何科学理论与其运用之间都存在这样一种对立统一的关系。由于热力学演绎体系的高度抽象性和概括性，也就必然给化学带来巨大的作用和深远的影响。

(1)由于从热力学定律演绎出的结论，与从物理化学实验方法得到的实验事实和归纳结论相一致，这就进一步确证了原有物理化学经验规律的客观真理性。例如，在十八世纪到十九世纪初，就从实验中发现了难挥发性溶质的稀溶液的四个依数性，并得到了一套公式；在十九世纪中，又有由经验归纳得到的盖斯定律、克拉贝龙—克劳修斯方程式及分配定律等。这些用物理化学实验方法得到的一系列经验规律，都被后来的热力学理论体系演绎出来。不仅二者达到高度的符合，而且热力学理论体系还使这些经验规律的本质在理论上得到了明确的解释。

(2)热力学演绎法使关于化学反应和相变过程等中的能量转化及过程的方向、限度等问题的知识，构成了一个系统的、完整的科学体系。十九世纪中叶，许多化学家从事于化学具体知识的研究，如对各种有机和无机化学反应的研究，对溶液性质的研究，对反应热效应的研究，对各种定性和定量分析方法的研究等等，从中得出了许多经验规律，如前面所例举的种种经验规律就是其中的一部分。但是，这些成果是分散的和零散的，理论上留下许多空白，不能形成一个系统的、完整的理论体系。有少数化学家鉴于实践的需要，也致力于化学反应的方向和限度问题的研究，但由于他们没有注意热力学理论对化学反应和相变过程等的巨大意义，而且在理论思维上还受传统的“化学亲和力”思想的束缚，所以，不能真正解决问题。在将热力学的理论和方法向化学领域移植和渗透之后，就找到了大量物理化学经验规律的内在联系，对它们进行了整理、提高和系统化，填补了经验规律的空白，把它们纳入了一个结构严谨的逻辑体系之内，使化学反应、相转变等过程的方向和限度问题得到了彻底的解决。

(3)热力学演绎法纠正了化学发展中的某些错误见解，预见了物理化学研究的新结果，开辟了化学的新领域。在化学史上，人们曾长期认为“化学亲和力”是化学运动的原因。十九世纪中叶，有的化学家还错误地认为反应热是化学亲和力的量度，因此，化学反应总是向放热方向进行；也有人错误地将“焓”理解为体系中所含的热量。在将热力学的理论和方法向化学领域移植之后，尤其是吉布斯在熵函数的基础上，引出了新的平衡判据和化学势之后，就使热力学成功地解决了普遍的化学反应的方向和限度等问题，从而使化学界逐渐抛弃了关于化学亲和力的陈旧观念，克服了过去一些错误的和不确切的见解。又例如，吉布斯关于相律和相平衡理论的建立，经十多年后，终于被化学家罗泽姆等人应用于研究水盐实际体系，并获得成功，从此就开辟了相平衡及相图这个新领域，取得了一系列新结果。后来，物理化学家们又把它应用于冶金学、建筑材料学、天然盐湖和盐矿的综合利用等等研究，都获得重大成果，并由此逐渐形成了物理化学分析这一新的学科分支。

高兴华　许　健

12. 化学工程中的科学抽象法

化学工程是工程技术的一个分支，它研究化工生产装置中所进行过程的规律性，并根据这些规律性的认识来解决化工生产中的工程问题①，例如实验工作的组织，过程的工程放大，设备的化工设计及操作等等。它对于化工生产的发展起着重要的作用。

化学工程是人们生产斗争和科学实验的总结，是从化工生产工艺中概括出来的，它的形成反映了人的认识由特殊到一般的过程。古往今来，劳动人民在漫长的生产实践中，逐渐形成了一套化学工艺知识和操作技术，它是从观察和实验中获得的经验材料的积累。在感性材料的基础上，为了取得对化工过程本质的、规律性的认识，就要进行一系列理性思维活动。科学抽象正是理性思维方法的一种形式。所谓抽象，就是透过现象抽取本质的思维过程，在科学研究中，对观察和实验中取得感性经验进行科学抽象，是一种必不可少的研究方法。

化学工程的特点在于它所研究的工业制造过程，其所用的原料不仅在物理性质上有了变化，在物质的化学性质上也有了变化，而且由于外界条件的变化，会对反应过程产生多样性的影响，每一个化工过程都是一个十分复杂的动态系统，要考察它的一般规律就不能不借助于科学抽象。因此，反应过程的多变性，影响因素的多样性以及反应产物的复杂性，这些特点决定了化学工程学科运用科学抽象方法的特殊重要性。翻开化学工程学科发展的历史可以看出，化学工程产生和发展的过程，就是撇开客观对象的其它特征而抽取本质关系的过程，就是不断地从特殊到一般进行科学抽象的过程。

学科的形成——概念的抽象

远在化学工程学科开始形成之前，已经有不少化学工业建立起来了。十八世纪末出现了以食盐为原料制造纯碱的新工艺——路布兰制碱法，由此也带动了硫酸、漂白粉等工业的生产。纯碱、硫酸等无机工业便成为近代化学工业的开端。随着钢铁工业的发展，在炼焦过程中又产生了副产品煤焦油，成为当时难以处理的“废物”。经过人们长期的生产实践，根据古代蒸馏酒相类似的原理，把煤焦油经过一系列的蒸馏操作，就在这个“废物”里提取出苯、甲苯、酚、萘等多种有机化合物，为合成染料、药品提供了原料，大大推动了化学工业的发展②。

(1)从化学生产工艺到单元操作的抽象

化学工程学科形成以前，每一种化学工业的工艺还被视为一门特殊的知识，比如制碱工艺学、制酸工艺学等，它们是分散和零乱的。但是随着实践的发展和经验知识的积累，人们开始寻求不同化学工艺中的共同规律，于是对各种化工过程中共同的加工步骤进行分析整理，终于抽象出其中应用广泛而为数不多的若干基本过程，这些基本过程具有共同的基本原理并各有其通用的典型设备，这就提出了所谓“单元操作”这一基本概念。例如人们发现无论对气体的洗涤还是在盐酸的生产中，用溶剂吸收气体中的杂质与吸收混合气中的氯化氢所遵循的规律是一样的，其吸收速率都具有同样的表达形式：N_A =

① 北京大学化学系：《化学工程基础》，人民教育出版社，1979年，1页。

② 上海化工学院：《基础化学工程》（上册），上海科技出版社，1978年，1页。

K_G (P－Pi)[1]，其中N_A表示单位时间通过单位表面积所传递的物质量，K_G是取决于操作状态和被吸收气体性质的常数，P－Pi是吸收推动力。同样它们也具有相同的物料衡算关系：$V(Y_1-Y_2)=L(X_1-X_2)$[2]，式中V表示惰气的流量，L表示溶剂的流量，Y_1-Y_2是混合气人塔与出塔的浓度差，X_1-X_2是吸收剂出塔与入塔的浓度差。人们还发现废气回收、从混合气中抽提有用产品等过程都具有这样的规律，于是便从这些看起来不同的过程中，抽出共同的东西加以研究，以便提高生产效率，这样，“吸收”这一单元操作便产生了。同样在烧碱制造中，碱液借蒸发而浓缩，而在食盐精炼及制糖等工业中，有关溶液亦须借蒸发而获得浓缩，从溶液蒸发液体的原理也是相同的，于是“蒸发”也被列为单元操作。

在各种化学工业的工艺中，都要涉及到流体流动，人们从大量的事实中发现，所有流体流动中的能量关系都遵守柏努里方程，物料衡算都遵守连续性方程，后来就把流体流动所涉及到的共同规律化为一种单元操作即“流体流动”。被抽象成为单元操作的还有蒸馏、萃取、过滤、结晶、干燥等。各单元操作在数量关系上都有自己特有的关联形式。这样，运用科学抽象方法，人们完成了由分散的工艺学向较规整的单元操作的过渡。本世纪二十年代，各种单元操作概念的形成，使人们得到一个结论：任何化工过程不管情况多么错综复杂，都可以归结为若干基本过程，同时结合生产的具体要求，若干基本过程可以串联组合构成一个制造程序[3]。

（2）由单元操作向“三传”的抽象过程。

科学概念初步形成后，还要随着人们认识的深入和扩大而不断发展，不断精确和完善，这就需要在更深层次上运用科学抽象方法。当单元操作的各种概念被了解得更深入以后，人们又发现了各操作在数量关系上存在着共性。例如萃取和吸收虽然是两种性质不同的单元操作，各有自己的外部形式，但我们可以进一步，抽象和概括其内部共同的本质属性：它们都包含物质从一个相到另一个相的传递过程；只要推动力存在，这种传递现象就不会停止。显然，萃取是物质从一个液相到另一个液相的传质过程，而吸收则是物质从气相向液相的传质过程，它们都有传递速率和传质极限问题（即平衡问题）。除了吸收和萃取外，蒸馏、干燥等过程也都存在这种共同的规律：质量传递原理。当深入研究这些单元操作后，便抽象出了“传质”概念。

就其它的单元操作而言，蒸发不过是传热的一种形式，干燥和蒸馏则是既包含传热又包含传质的操作，抽象出这些操作在热过程方面的共同规律，便形成“传热”概念。流体的流动也是化工过程的一个普遍现象，它同传热和传质一样，也被看作是一种传递现象，即“动量传递”。于是，单元操作就可以看成是传热、传质和动量传递的特殊情况或特定结合。因此“三传”概念的形成是对各种单元操作的进一步抽象的成果。

从各种单元操作概念的形成到“三传”概念的确立，作为一门化学工程学的骨架就建立起来了。由此我们看到科学概念是认识在一定阶段的总结，它是以抽象的形式表现大量知识的一种手段。正是通过反复的科学抽象，人们才逐步认识各种化工过程的一般属性，形成概念，建立理论体系。化学工程学科自本世纪初形成至今，又有了新的发

①、② 华东化工学院等：《化工过程及设备》（下册），中国工业出版社，1961年，405、414页。
③ 张洪沅等：《化学工业过程及设备》（上册），高等教育出版社，1958年，2页。

展，正在进入系统工程学阶段。

复杂问题的简化——理想化抽象

科学抽象的另一种形式是建立理想模型。理想模型以客观存在为原型，是对客体的一种近似的反映。由于化学工程研究对象的多样性与复杂性，这种理想化的抽象方法就成为简化问题的极重要的工具。

(1)从复杂因素中抽取主要因素

运用理想化抽象方法，可以在观察和实验的基础上，把研究对象置于比较理想的纯粹状态下，简化复杂因素，纯化主要因素，忽略偶然和次要的因素，从而便于描述和处理复杂问题。化学工程中研究流体流动规律时，就应用了“理想流体”这一模型。理想流体的特点是：重度不随压强和温度而改变，粘度为零①。这种流体在实际过程中是不存在的，但是运用它可以突出流体流动中机械能转化这一主要因素，而且因为理想流体流动时只有机械能之间的转化而无内能的增减，就可以使流体流动规律大大简化。将这种规律应用到实际流体的流动时，只要加入阻力项进行修正，就使一个复杂的实际流动问题简化为阻力的求取了。所以科学抽象能帮助我们更好地把握和解决实际问题。

同样，在讨论蒸馏中气液相平衡时，采用“理想物系”模型（任一组分在气相中浓度与在液相中浓度成比例）、“平衡蒸馏”模型（存在液相中的所有组分必存在于气相之中，两相的温度和压力均相等），以及干燥中的“理论干燥过程”（干燥过程在绝热情况下进行）等等，这些模型都是理想化抽象的成果，它从复杂的实际过程中恰如其分地反映其主要因素的影响，从而形成一幅简明的图象，使问题得到定量的描述和计算。

（2）从感性经验中提取抽象规定

在科学抽象进程中，人的认识总是从个别到一般，即由具体到抽象，然后再从一般到个别，即由抽象到具体的辩证过程，因此抽象规定是具体到抽象这一阶段的产物。

在化学工程中，无论是流体流动还是“三传”过程，客体的每个质点在每一时刻的点速度和质量能量都在变化之中，为了定量描述它们，必须从经验材料中提取一些本质的东西形成抽象规定，使问题得以简化。比如“边界层”就是这样的一个抽象规定。当我们研究真实流体流过固定壁面时，由于流体具有粘性，粘附在固体壁面上静止的流体层与其相邻的流体层间产生摩擦力，使其相邻流体层的流动速度减慢，这种减速作用离固体壁面越远影响越小。经验表明对于一般流体流经固体壁面要形成集中速度梯度变化90%以上的流体层，这样就把速度梯度显著存在的流体层称为“边界层”②。在边界层厚度以内，流体的粘性占主导地位，而在边界层以外，流体的粘性就可以忽略，这里的流体已可以近似地当作无粘性的理想流体了。这样在我们研究真实流体流动时，只要集中注意流动边界层内的变化即可。边界层的概念用于传热与传质过程就称为传热边界层与传质边界层。在传热边界层中，集中了温度梯度的全部变化，而传热边界层以外温度梯度已消失，所以对流传热就可以看作为相当于通过厚度为δ_t的传热边界层的导热过程，在边界层δ_t内包括了真实的滞流内层厚度δ_b和与滞流层外的传热边界层相当的虚拟

---

① 上海化工学院：《基础化学工程》（上册），上海科技出版社，1978年，24页。

② 上海化工学院等校，《化学工程》第一册，化学工业出版社，1980年，80页。

厚度δ_t。经过这样的理想处理后，我们就可以利用导热的数学公式描述传热边界层内流体的物性参数及各种状态变量与传热量的关系了。其它如精馏“理论级”，传质中的“膜阻力”，计算流体能量时的“头”的概念，等等，都是抽象规定。借助于这些抽象规定，不仅可以认识现象的本质，而且便于用数学方法来处理。

(3)从复杂过程中抽取出本质的过程

在科学抽象中，对于化工过程的各种感性认识，经过一番“去粗取精，去伪存真，由此及彼，由表及里”的整理加工之后，人们就有可能透过纷繁的现象掌握其内在机理，把一个复杂的过程抽象为一个理想的过程。

在研究气相中的溶质传递到液相中的吸收过程时，吸收的推动力比传热中的温度差要复杂得多，它不仅有各种不同的表示法，还涉及到相平衡问题，两相的接触面也没有换热器中那样明确。因此求取吸收速率要比求取传热速率复杂困难。这时就要搞清溶质在气、液相中的传递及界面情况。在吸收设备中气液两相通常呈湍流，不仅存在分子扩散和涡流扩散，而且湍流脉动与流体流动、设备几何特征等密切相关，在这种情况下要描述整个吸收过程，就必须抓住传递过程的主要矛盾——传递阻力。于是1923年刘易斯(W.K.Lewis)和会克曼(M.G.Whitman)两人提出了双膜模型[①]，此模型是从气液两相间质量传递的机理出发，通过三条理想化抽象而建立起来的：第一，认为在气液两相接触的界面上，分别存在着滞流流动的气膜和液膜，扩散是以分子扩散形式通过这两层膜进入液相的；第二，相界面上无吸收阻力，两相的浓度在界面上总是平衡的；第三，扩散过程的全部阻力都集中在双膜内。上述理想化抽象把吸收过程归结为溶质在两层膜中的传递过程，虽然与实际机理不尽相同，但是根据此理论推出的气体吸收速率公式能较好地应用于实际过程，由此解决了一系列相间传递问题，目前仍被认为是一种比较合理的模型。

内在联系的揭示——数学抽象

从“具体到抽象”得到的抽象规定包括各种概念、理想模型等，经过进一步综合就可以上升到思维中的具体，实现“抽象到具体”这一过渡。数学抽象是运用数学方法着重从量的方面进行的科学抽象。数学抽象的结果一般是数学模型，它是用数学语言构成的。数学抽象可以使人们在思维中掌握各种化工过程的内在联系，解决生产中的实际问题。

(1)从不同质的过程中抽取量的关系

化学工程的主体是“动量传递、质量传递和热量传递。”这三种不同的传递过程其内容是全然不同的，但通过数学抽象，它们的通量表达式都可以表示为$S=-K\frac{dy}{dx}$[②]，式中S代表单位的传递量，K是表示物质传递性能的特征常数，$\frac{dy}{dx}$是强度梯度。由此可见三种不同的传递过程具有完全相似的数学形式。这样我们就可以借助比较成熟的传热理论来研究更为复杂的传质现象。

对于各种流体的流动过程，也可以不考虑何种流体在何种场合和条件下进行，用纯

---

① 华东化工学院等：《化工过程及设备》(下册)，中国工业出版社，1961年，403页。

② 〔英〕J.M.柯尔森：《化学工程》卷Ⅰ 化工出版社，1983年，465页。

粹的数学抽象来把握各种变量之间的关系。依据质量守恒定律可以得出流体流动时间的微分质量衡算方程：$\frac{\partial(\rho U_x)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho U_y)}{\partial y}+\frac{\partial(\rho U_z)}{\partial y}+\frac{\partial\rho}{\partial Q}=0$①，式中：$U_x$、$U_y$、$U_z$分别是速度在点（x，y，z）沿x，y，z方向的分量，Q为时间，ρ是流体密度。这个公式撇开了具体流体的特性，抽取了不同流体的内在联系，为理论分析提供了科学根据。

数学抽象撇开了客观对象的具体内容而只抽取各种量的变化及量之间的关系，便于在纯粹的形态上进行研究，从而反映化工过程中量的规律性，总结出各种化工数学公式，这些公式为化工研究提供简洁精确的形式化语言，提供数量分析和计算方法。例如在化工生产中不管什么过程，根据质量守恒定律，原料的重量应等于操作后所得产品的重量，我们就可以抽取量的关系式$\Sigma F-\Sigma D=A$，其中F是进料量、D是出料量、A是积累量，这就是物料衡算方程。

在作能量衡算时，我们也可以抽象出：能量输入流率－能量输出流率＝能量积累率，这是撇开能量的具体传递过程而抽象出来的，为了能定量描述能量的传递过程，可以由此式出发，利用数学推导，进一步得出在一个系统内的总能量衡算式：$\iint_A \rho u E\cos\alpha\cdot dA+\frac{d}{d\theta}\iiint_V E\rho dv=q-W$②式中各项均表示单位时间的能量，即能量流率（J/S），用此式就可以定量分析任何一个具体过程的能量关系问题。

（2）把动态过程抽象成数学模型

为了描述一个已经发生的过程或者一个正在操作的化工设备，就必须将生产现场的实测数据，归纳成为数学模型。数学模型的建立是对化工动态过程的合理简化和提炼，所以是一个多级科学抽象的过程。

在化学工程中比较典型的数学模型是反应器设计中所用的扩散模型。在化工生产中，反应器内的物料流动都是非理想流动，简单的平堆流模型和合混流模型很难用于反应器设计，这就要求建立一种更加接近实际过程而又可以用数学语言描述，电子计算机求解的数学模型。扩散模型就是这样一个模型。在一个管式反应器中，物料流过反应器产生返混现象，我们利用一个轴向有效扩散系数来模拟返混的程度，假定反应器每一截面上扩散系数相等，径向无浓度梯度，那么根据物料衡算，就可以写成数学形式，即下面的微分方程：$\frac{\partial C}{\partial t}=D\frac{\partial^2 C}{\partial L^2}-U\frac{\partial C}{\partial L}$③，根据初始条件和边界条件，对上述数学模型进行求解即可得到反应转化率随时间变化的关系。

数学模型是描述化学工程的基本手段。它把事物的各种属性和关系综合起来，把反映事物本质的各种抽象规定结合为统一的整体。因此建立数学模型的整个过程，是“感性具体——抽象规定——思维具体”这一科学抽象全过程的反映。

综上所述，科学抽象法在化学工程中的地位十分重要，它是化学工程不断进步的阶梯。正如列宁指出：“物质的抽象，自然规律的抽象，价值的抽象及其他等等，一句

---

① 上海化工学院等：《化学工程》（第一册），化工出版社，1980年，73页。

② 天津大学等：《化工传递过程》，化学工业出版社，20页。

③ 陈敏恒等：《化学反应工程基本原理》，化学工业出版社，1982年，110页。

话，那一切科学的（正确的、郑重的、不是荒唐的）抽象，都更深刻、更正确、更完全地反映着自然。”①随着化学工程的发展，科学抽象方法将发挥愈越重要的作用。

盛　维　勇

13．化工系统方法

系统是相互联系、相互作用的若干部分（要素）构成的具有确定功能的统一整体。系统方法是从系统的观点出发，始终着重从整体与部分之间，整体与外部环境的相互联系、相互作用、相互制约的关系中综合地、精确地考察对象，以达到最佳地处理问题的一种方法②。系统是分层次的，石油化工联合企业是一个系统，化工系统是它的子系统。化工系统是由化工企业管理系统和化工过程系统组成。化工企业管理系统由公司系统和工厂系统组成，工厂由工艺车间、公用工程（水、电、汽系统）、仓库等组成。每一个工艺系统又由若干单元过程及设备组成，化工单元过程及设备是化工系统中更小的子系统。系统方法移植到化工系统中形成化工系统方法。化工系统方法包含着丰富的辩证法思想。化工系统方法的基本特征或基本原则是它的整体性、关联性和动态原则。研究这种基本特征的方法是分析和综合。

整　体　性　原　则

整体性是化工系统的最基本特征或最基本原则。它体现在：

（1）系统的规律性是整体的规律。由于化工系统的整体与部分，部分与部分，系统与环境之间存在着有机的联系，系统的性质和运动规律只有从整体上才能显示出来。传统的化学工程往往孤立地研究流体流动、传质、传热、化学反应等单元过程和反应器、蒸馏器、热交换器等单元设备的特性和规律；而化工系统工程则着眼于系统的整体，既研究组成系统的各单元过程和单元设备这些子系统的宏观特性和规律，又研究单元过程和单元设备各子系统之间的相互关系以及它们之间的组合特性和规律，就是说，研究整个系统的特性和规律。如，一个四组分混合物的分离系统，需要三个精馏塔，不仅要研究每个塔的特性和分离规律，更要着眼于总分离系统，研究各个塔的相互联系、相互制约的情况，找出三个塔联结的总的特性和分离规律。

（2）系统功能的整体性。化工系统中各部分的功能必须服从系统整体的功能，系统的功能不等于各部分功能的简单加和。一个化工系统的整体，其功能是由各部分相互作用产生的。由于各部分的相互作用，使系统的整体出现了各部分单独存在时所没有的功能。系统整体的功能只有在它作为整体存在时才存在，把它分解为各个部分之后，整体的功能就不存在了。引进的年产三十万吨合成氨装置，从单元过程和单元设备来说，不是每个部分都先进，如合成系统，指标不高，每年每吨触媒合成氨产量比国内水平还低，但各部分组合成整个合成氨系统以后，整体达到最优。整体功能远远超过各部分功能的加和，其整体出现了各部分单独存在时所没有的功能，如每吨氨国内能耗1800万大

① 列宁：《哲学笔记》，人民出版社，181页。
② 《自然辩证法讲义》，人民教育出版社，1979年，399页。

卡，而引进装置每吨氨能耗只有700—1000万大卡，成倍的降低。

（3）系统整体的最优化。由于化工系统的规律是整体的规律，功能是整体的功能，所以要从化工系统整体目标出发，使之达到系统整体的最优化。如，对一个生产过程，往往要求它达到的目标函数是产值最大、效率最高、成本最小、质量最好、消耗最低等。系统的目标函数写成数学形式，表示为$J=f(x, u, \xi)$，其中x为状态变量，u为决策变量，ξ为参数变量。J正是描述系统整体效果的目标函数，在满足一定约束条件下使选定的目标函数取最大或最小值，这就是系统整体目标一定条件下的最优化问题，也就是化工系统整体的最优化。

关联性原则

关联性是化工系统的又一基本特征或基本原则。它是辩证唯物主义关于事物普遍联系观点在化工系统中的具体化。关联性原则研究的是系统各部分之间、系统和环境之间形成的各种联系。它体现在：

（1）系统的多样性。化工系统中各子系统之间、整个系统和各子系统之间、系统和环境之间是相互关联的。如果从组成化工系统的基本单元来看并不复杂，其泵、压缩机、塔设备、换热器、蒸馏釜、反应器、各种仪表等组成反应系统、分离系统、传热系统、物料系统、设备系统、能量系统、信息系统等。但是，这些系统输入与输出、参数与变量、特性与功能、质量与能量等的不同，形成错综复杂的关系，组成多种多样的系统。由于化工系统是由许多错综复杂的子系统组成的，其规模大小不等，所以才能生产出千千万万种化工产品。

（2）系统的有机性。化工系统的多种形式有一个共同的特征，即它的有机性。系统之所以具有它的整体性，是由于组成系统的各部分之间保持着有机的联系，从而形成一定的结构。这种有机性表现为化工系统只有在运动中，按着一定的规律在进行着整体与部分，部分与部分、整体与环境以及不同层次之间的物质、能量、信息的交换中，才体现为系统整体的一定的特性和功能。一个化工系统，虽然各部分按一定的关系相互组成一个整体，但如果没有运动，就是说如果没有动量传递、质量传递、热量传递、化学反应，即“三传一反”，没有信息传递，它的整体的特性和功能就不能显示出来。如果一个系统“三传一反”和信息传递遭到部分或全部破坏，这个系统也就失去了有机性，也就会部分或全部失去它的整体的特性和功能，产品生产不出来或者不合格。

（3）系统的有序性。凡系统都是有序的。系统的有序性是系统有机联系的反映。系统的稳定联系构成系统的结构，系统的结构保障了系统的有序性。系统结构的强弱标志着相互作用的大小。化工系统是多层次的，有横向联系，也有纵向联系，相互交错构成网络立体模式。一个化工工艺系统，各单元设备的相互连接、各化学反应的先后、物料的加入和排出、能量的输入与输出等等，都是有序的，一定的有序衔接和搭配才能使整个系统达到最优化操作。在一个现代化的化工企业中，为了实现某一工艺过程，往往需要将若干股热物流从给定的温度冷却到某一终温，同时又需要将另外若干股冷物流从给定的温度加热到某一终温。这就需要若干台不同规格的换热器进行冷热物流的热交换。按照工艺条件的要求，把这些换热器相互联结在一起就构成了换热器网络。对于一个给定的工艺过程，由于冷、热物料之间的“匹配”方案不同，各台换热器热负荷不

同，所构成的换热器网络也各不相同。其中有一个最优的序列搭配构成最优化换热器网络。

动 态 原 则

要研究系统的功能，就必须研究系统的运动，即研究系统的状态随时间而发生各种变化的规律，这就是系统的动态原则。系统的动态原则是化工系统方法的又一基本特征。动态原则是辩证唯物主义关于事物发展变化观点的具体化。它体现在：

（1）系统的随机特性。任何一个化工过程系统中的反应系统、分离系统、传热系统、物料系统、设备系统、能量系统、信息系统等，由于条件的变化，各种因素的干扰和影响，系统的输入和输出表现在时间、空间以及数值上有随机特征。如，间歇操作中物料的浓度、温度、压力和流量等均随时间而变化；开工和停工过程中各种参数都在不断变化；有些工艺系统由于工艺原理本身决定对某些操作条件扰动十分敏感，等等。因此，除了要研究系统的稳态特性而外，还要研究系统的动态特性。这种随机的特性，在化工过程系统中表现为下述几种典型：过程系统是确定性的，系统的输入是随机性的，如某一反应器是一个确定性的，但它的进料浓度的波动是由前一级的物流干扰而引起的随机波动；系统是随机性的，输入是确定性的，如一个完全混合槽反应器或填充床反应器，它是一个随机系统，无论什么情况下，一个确定性的输入，反应器的输出都是随机性的。在一个特定空间中颗粒的运动就是一种常见的随机运动，旋风分离器中的粒子运动，液体的湍流运动，流化床中气泡的形成、生长、破裂和颗粒的环流等，也都是典型的随机运动。

（2）系统的动态平衡特性。化工系统是一个动态的整体结构系统。系统的运动和平衡是不可分割的，运动是平衡中的运动，平衡是运动中的平衡，系统是“运动和平衡的活的统一”①，即这种统一是一种动平衡状态。动平衡是在整体的多次反馈中通过自我调整实现的。我们希望任何一个化工系统都要有稳定的结构。接近平衡的状态是稳定的、持久的，不平衡状态是不稳定的、暂时的。通过调整，不平衡状态可以逐渐过渡到平衡状态。系统由于内外条件改变和扰动的影响，平衡又被破坏变为不平衡。再次调整，又恢复到平衡。一个化工过程系统就是处于这种动态平衡之中。研究化工系统的动态平衡，就应该研究系统的稳定状态，即平衡状态是怎样出现的，怎样运用系统的信息和反馈方法，不断进行调整，达到平衡状态，使化工过程系统整体处于最佳化。所以，利用动态原则可以深入研究化工系统产生、发展和调整过程。

化 工 系 统 的 分 析 和 综 合

研究化工系统的基本特征或基本原则的方法是分析和综合的方法。列宁指出，辩证法的要素之一是“分析和综合的结合，——各个部分的分解和所有这些部分的总和、总计。”②在化工系统方法出现以前，化学工程的研究方法主要是分析方法。研究一个化工过程，首先把这一过程分解为各个部分，即分解为若干单元过程和单元设备，然后再

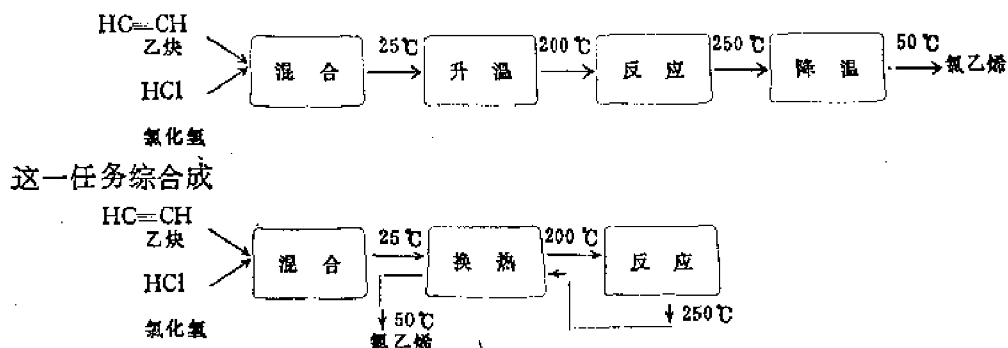
---

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，224页。
② 《列宁选集》第2卷，人民出版社，1975年，607页。

把它们衔接起来，综合成整个化工过程。这里虽然也是分析和综合，但着眼于各个部分，以分析为主。这种分析方法在以“三传一反”为主要内容的化学工程中，曾起到很大作用。这种分析方法仍然在现代化工中被大量应用，但是它有局限性。现代化工企业的特点是大型化、综合化、连续化和自动化，对这样多层次的复杂系统，分析方法就无能为力了，适应这种情况，系统方法出现了。系统方法也是分析和综合的结合，但它着眼于整体，从整体出发，先综合，后分析，再回到综合，分析和综合紧密结合。所以，这种方法充分体现了它的整体性原则，本质上是综合的。

系统分析，其主要任务是通过对给定系统的各子系统特性的研究，按照系统结构上的特点推断整个系统的特性。要将一个复杂的化工系统分解成简单的子系统以后，才便于研究和计算。因为在一个化工过程中，单元过程和单元设备多，物料流和能量流来回串接，构成各种再循环回路，使过程变量值很多，就是说，一个过程系统实际上是一个包含了很多变量的一些方程式组成的庞大复杂的方程组，数学模型有时达几百几千个。处理这样的方程组，在实际模拟计算中十分困难，所以必须将系统进行分解处理。如，一个接触法制硫酸的工厂，其工艺物流变量约有一千个，设备参数约有二百个，描述这一过程的数学表达式约有五百个非线性方程。对这样一个化工系统，电子计算机很难直接求解。为了处理这样的大系统，我们必须将其分解成子系统，采用系统分析的方法。系统分析通常包括三个主要内容：将系统分解成子系统；建立子系统的数学模型，研究子系统的特性；将子系统的数学模型按照系统特定结构用数学组合起来，并在计算机上求解，从而得到系统的特性。可见，系统分析的核心问题是：建立能够正确描述子系统特性的数学模型，并据此推测整个系统的特性。

系统综合，就是把各子系统以及它们之间的关系综合成一个系统结构，它的主要任务是按照某种步骤，设计一个能够完成给定目标函数的最优系统的程序。定性的系统综合思想早已在化工过程综合中获得了应用，如节能工艺流程，



由上图可以看出，经过合理综合以后，在保证正常开车与生产的情况下，能量回收比较合理，减少了设备。但是，由于缺乏定量计算方法和工具，这种化工系统综合思想只是凭借工程师的直觉和经验应用于化工过程的设计中。电子计算机的出现和系统方法在化工中的应用，才使系统综合定量化。优化分离塔序、优化换热器网络等复杂化工过程优化问题都实现了系统综合定量化。系统综合通常包括三个主要内容：进行系统的规划，选择子系统组成系统；对组成的系统进行分析，将系统分解成子系统，研究子系统的特性，推断系统的特性，即将系统的综合问题变换成子系统的综合问题；根据优化判据对系统进行技术经济评价与优选，筛选出最优系统。为了综合一个结构未知的最优化化工

系统，通常采用系统综合的方法。系统综合是现代化工企业的关键技术之一。

进行化工系统的数学模拟也要应用分析和综合的方法。将一个复杂的化工系统分解为次级系统，次级系统分解为单元操作，以便研究和建立数学模型。最低一级系统的模型解决了，再逐级综合成为高一级系统的数学模型。整个系统的数学模拟以次级系统的模拟为基础，而次级系统又以单元操作模拟为基础，单元操作模拟则以“三传一反”为基础，而“三传一反”又基于物料衡算、能量衡算等计算。所以物料衡算和能量衡算等是化工系统模拟的基础。化工系统数学模拟的过程就是运用分析和综合方法的过程，这个过程充满了辩证法。

边克忠

14. **化工数学模拟方法**

先设计与某一自然现象或过程（即原型）相似的模型，然后通过模型来间接地研究原型的规律，这种实验方法叫做模拟方法。数学模拟，是以模型和原型之间在数学形式相似的基础上进行的一种模拟方法[①]。本世纪六十年代，由于石油化工发展的大型化及电子计算机在化工中的应用，出现了化工数学模拟方法。把与系统有关的数量关系归纳成为反映系统机理与特性的数学方程组，这些数学方程组就是系统的数学模型。在约束条件下，借助电子计算机求解数学方程组的过程就是数学模拟。如，模拟系统是一台电子计算机，它所演算的数学方程组B可以足够准确地描述化工系统A的过程，那么为了知道化工系统A的特性和规律，在电子计算机上对数学模型B进行试验研究，这种方法就叫做化工数学模拟方法。

化学工程研究方法的突破

数学模拟法在化工中的应用，是化学工程研究方法的突破，其表现是：

（1）从物理模拟到数学模拟

三十到五十年代，从探索性实验研究到工业化生产，采用相似模拟放大方法。相似模拟方法是根据相似理论建立起来的放大方法。它是根据对化工过程的理解和掌握，确定有关的影响因素；根据相似转换和因次分析，由这些有关因素确定实验模型和大型装置之间的相似条件；根据相似条件，构造实验模型，从实验模型结果预计大型装置的性能[②]。由于这种相似，其模型和原型之间只有大小比例上的不同，而物理过程都是一样的，所以它是一种几何相似和物理相似。这种相似模拟法只适用于简单设备中的流体输送、传热、传质等各种物理过程，成功地解决了这些过程的开发放大问题。但是，这种方法处理不了带有化学反应的过程。因为理论和实践都证明，同时保持几何相似、物理相似和化学相似是不可能的。因此，在有化学反应的过程中，不能用相似模拟法。数学模拟法的出现解决了有化学反应过程的模拟放大问题。数学模拟法是指一个实际化工系统用一定的数学语言加以描述，或者说用数学方法模拟一个实际化工系统，用电子计算

---

① 《自然辩证法讲义》，人民教育出版社，1979年，251—253页。

② 上海化工学院化工机械系，《化学反应器数学模拟放大》，上海科学技术情报研究所，1974年，1页。

机进行研究、设计和放大。这就使化学工程的研究方法从物理模拟过渡到了数学模拟。

（2）从定性到定量

在化学工程研究中，传统上采用经验和半经验的方法。在早期化学工业中，运用经验方法。它是依靠对已有装置的操作经验而建立起来的以认识为主实行放大的方法[①]。这些认识多半是定性的，因此不够精确、经济。但是，只要能集中多方面经验，进行一定分析，往往能抓住要害，收到较好的放大效果。目前某些不能用其它方法解决的课题，还在用经验放大法。化学工程的发展，从运用经验方法进入半经验半理论的方法。这种方法是根据化学工程学理论，对化工过程的某些部分以数学形式作出描述，然后在小装置中进行试验验证，以便修正这些数学关系式，或者结合经验的判断，定出设计方法或所需要的结果。这种结合相应的实验，简化问题，突出矛盾的半经验半理论的方法在化工过程开发与放大技术中得到了广泛应用。数学模拟法在化工中的应用，又使这种半经验半理论的方法逐步向定量的理论方法过渡。

（3）从化工中间试验到数学实验

化工中的中间试验是从实验室理论研究过渡到工业化生产的关键。它的主要目的是要求长期运转获得合格产品，评价工艺路线和生产流程的合理性，催化剂的优越性以及考核设备结构的强度、材质、测试、仪表控制、安全、三废处理等问题。可以说，中间试验在化工开发研究中起决定性作用。用电子计算机进行过程的数学模拟，可以代替部分中间试验。在数学模拟中，一个数学模型就描述了一个实际中间试验的各个参数及变量间的数学关系，对这个数学关系进行研究就等于研究这个实际试验过程，在电子计算机上进行改变各种参变量的计算，就了解了不同条件下这个试验过程的各种情况，就等于作各种条件试验，这就是模拟实验，即数学实验。数学实验开始代替部分中间试验，这是试验方法的一个突破。化工中间试验也可以看成是对小试的一种物理模拟，数学实验是数学模拟，所以从化工中间试验到数学实验也可以看成是从物理模拟到数学模拟。

数学模拟法的实践基础

数学模拟法来源于实践，又被实践所检验。虽然数学，特别是计算数学起了重要作用，使以往化学工程中的许多问题得以解决，但是数学并不能解决化工中的一切问题，不能代替必要的实验研究，必须以实验为基础。数学模拟法的实践基础表现在：

（1）模型的建立

要建立一个系统的数学模型，需用两类信息，一类是关于系统的知识和理解，另一类是对于系统的输入、输出所观测的数据。因此，必须从分析该体系的物理和化学本质的机理出发，而这些机理是通过实验揭示的，如化学热力学规律、化学反应动力学规律、传递过程规律的数据都是由实验测定的。只有对化工过程机理本质有较深入的了解，对其内在规律性有较完善的资料，才能建立它的模型。由于一个化工过程和系统往往很复杂，我们不可能一下子就对它认识的十分深刻，以至于用一个精确的模型来描述它，但是可以通过简化，用一个简单而明确的模型来代替复杂的实际过程和系统。只有通过简化才能将复杂的实际过程和有限的数学手段协调起来，才能得出反映过程和体系

---

① 陈甘棠、梁玉衡：《化学反应技术基础》，科学出版社，1981年，9页。

物理、化学本质的数学方程的函数关系。但是，简化必须有几条原则[1]：一是简化而不失真实性。要通过实验透彻了解过程和体系的物理、化学本质和规律，抓住反映过程和系统本质的主要矛盾，舍去不反映本质的次要矛盾，这样建立的模型才能简化而不失真实性。二是简化而能满足应用的要求。要根据实际过程和体系对模型精度要求的不同而建立或繁或简的模型，满足实际应用的要求。三是简化而能适应当前实验条件。任何一个数学模型的建立都必须进行模型鉴别和待定参数的估值，而模型的鉴别和参数的确定又必须依赖于实验，因此建立模型时就要简化而能适应当前实验条件。四是简化而能适应现有计算机能力。现有计算机能力的限制和编制程序复杂性的限制，对模型简化要使之适应计算机的计算能力。简化的这几条原则，有的是以实验为依据，有的是为了实际应用的要求，有的是与实验条件和计算工具相适应，因此这种简化了的模型用于模拟实际化工过程和系统就有了坚实的实践基础。

（2）模型参数的估值

模型是一个实际系统的各个参数及变量之间的数学关系。模型函数选定以后，要根据实验数据求取该函数中所含参数的值，这就是模型参数估值。一个模型可能包含若干个模型参数，这些参数可用不同的方法取得：根据过程机理推导出来，而这些机理是通过实验揭示的，如主副化学反应的相互关系，微观动力学历程及其速率控制等都是通过实验弄清的；有些参数难以用实验测定，如流化床反应器中气泡相和乳化相相间交换量，一般要通过模型计算的总结果和实验结果比较，用反推方法得到。虽然方法不同，但根本原则是一致的，即选取参数值使得模型的计算值与实验值最相接近，这样的原则就是以实验为基础的原则。

（3）模型的鉴别和筛选

有时同一过程和体系可以有二个或二个以上的模型，因此要对模型进行鉴别和筛选，确定最合适的模型。这就要从这些模型中淘汰一些不合适的模型，选出一个或几个合理的、有效的模型，或者考察给定的模型本身是否合理以及是否能有效的模拟所研究的过程和体系。对机理模型，是鉴别哪一种反应机理反映了该化学反应的真实过程；对经验模型，是鉴别哪一种经验方程式已足够可靠，不致与实验数据偏离太大。鉴别与筛选的方法很多，但无论采用哪一种方法，其标准就是一个，即实践。

（4）在实际应用中检验

经过合理简化的模型，可以在一定程度上用来模拟一个实际化工过程和系统。但它毕竟不能精确地反映实际过程和体系的全部内在规律性。此外，模型虽然经过实验检验，但有时在应用中却发现某些模型不合适。这种情况的造成，其原因是：模型适应范围的限度，实验决定的参数适应范围的限度，参数估值中的误差和环境中的不确定因素的影响。因此，要根据得到的模型在计算机上进行计算，把结果送到实验设备中去进行实际检验，经过对实验数据的分析，进一步修正模型和参数，再次回到规模更大的实验设备中进行验证，直到模型与实验比较好的吻合为止。这样获得的模型才能用于生产实际中。经过生产实际的检验，又可以利用生产实际的数据进一步修正模型，这种经反复修正趋于完善的模型可以用来指导生产操作和控制生产过程。

---

① 李启兴等：《化学反应工程学基础·数学模拟法》，人民教育出版社，1982年，9页。

数学模拟法的核心是建立数学模型。从上述分析可以看到，一个数学模型的建立，是一个从实践到理论，又把理论用于实践的不断提高的认识过程。这一过程的每个环节都离不开实践的检验。所以，数学模拟法的基础是实践。

数学模拟法在化学工程中的应用

由于数学模拟法以实践为基础，又不断受到实践的检验，所以它可以很准确地描述实际化工过程，在化工中正在得到广泛应用。

（1）用于过程开发和放大技术

过程开发是指把化学实验室的研究结果变为工业生产的全部过程。它涉及实验室研究、模试、中试、设计、技术经济评价、试生产等许多内容。而中间试验是过程开发的核心。数学模拟放大是利用现有的技术情报资料、技术数据、同类过程的成熟经验、小实验结果和化学工程知识，整理抽象为数学模型，然后在电子计算机上解这些方程式，获得数值解。如果数值解与中间试验结果相符，这个数学模型就可用于放大计算。如果数值解与中间试验结果不符合，则要修正数学模型直到相符合为止。数学模拟放大方法大大缩减了新产品、新工艺从小实验成果放大为工业生产的周期。六十年代以来，国外过程开发周期已从过去的7—10年缩短到4—5年，放大倍数达500—20000倍。如美国开发丙烯二聚制异戊橡胶，根据小试验2磅/天的结果，用数学模拟一次放大为45000吨/年成功，其中双聚管式反应器放大倍数17000倍，绝热式裂解炉20000倍①。实践证明，数学模拟放大方法可以减少或缩小中间试验装置，也有的可以代替中间试验。

（2）用于最优化设计

长期以来，化工流程和装置都是靠工程师的经验近似设计的。六十年代以来，由于广泛使用电子计算机，使化工设计从经验的估算走上理论的数学模拟阶段。数学模拟法用于最佳化设计是建立可靠的数学模型，建立目标函数，如产品成本最低，装置产量最大，投资最少，操作费用最低等，选择适当的最佳化方案。用这种方法进行设计时，可以很方便的在数学模型上改变或增减参变量，根据这种模拟试验就便于确定最佳设计方案。如，德国鲁奇（Lurgi）低压合成甲醇，1970年用数学模拟方法设计了4000吨/年的生产厂，1971年4月建成投产，开车两天后达到正常运转。而一般经验放大法则需十年或更长时间。

（3）用于最优化操作和控制

化工生产装置的实际操作往往不是最佳操作。要达到最佳操作，必须在最佳条件下运行。但现场生产装置一般不允许进行大量试验去寻找最佳条件。而用数学模拟方法进行系统的模拟试验，可以找到最适宜的操作条件，然后用于生产，强化生产装置，或为老厂挖潜和扩建新厂提出方案。如，对尼龙-6生产中的一个聚合反应器进行数学模拟，理论上可使产量提高80%，实验结果产量增加40%；英国帝国化学工业公司（I.C.I.）对石脑油裂解制乙烯、丙烯厂的操作进行最佳化数学模拟，改进了操作，第一年就获得节省25万英镑的效果。在化工实际操作中，生产过程经常由于各种干扰而使运行不稳

①燃化部石油化工科学研究院机械设备室，“化工过程的数学模拟——化工系统工程学方法简介”，《石油化工》1973年第2期，564页。

定，各种参变量随时间而变化。根据装置的化工动态特性进行数学模拟，把建立的数学模型贮存在电子计算机中，可以进行最佳化调节控制，

（4）用于化工发展预测

在制定化工发展的长远规划和生产管理过程中，都要对化工未来发展的各种情况进行分析和估算，也就是要进行化工预测，以便为决策提供科学依据。预测是一种严肃的科学工作。用数学模拟方法进行预测使预测更加科学化。用数学模拟方法预测，必须系统地全面地收集预测对象大量的可比资料与历史数据，应用数学分析的方法找出其固有的规律性，建立预测数学模型，然后编制程序，通过电子计算机进行模拟计算，得出预测值。管理决策者和分析人员再根据自己的经验和通过调查研究等定性预测方法对预测值作进一步假定与修正，完善预测数学模型，再次进行模拟计算。这样反复多次进行预测—假定—修正，得到一个实际有用的预测值。这个预测值就可以作为决策的科学依据。

数学模拟法有其局限性，表现在：第一，受到基础理论研究发展的限制。这种方法的可靠性大小，在相当程度上取决于对化工过程本身机理的认识程度。如果没有对所研究的化工过程本身机理的大量的实验研究和生产实践基础，就不能获得正确的理论抽象——数学模型。第二，解算数学模型手段的限制。这种方法使过去靠经验半经验的方法无法解决的许多化工中非线性方程问题，大部分可以解决了。但是，也并不是任何数学方程组组成的数学模型都可以顺利地在电子计算机上解算。如，化工系统的数学表达常常碰到高度非线性问题，有时出现“刚性微分方程”，这些在计算数学中也是正在研究的课题。这种局限性决定了计算机不能完全代替化学实验，那种“化学实验变得可有可无”的说法是不符合实际的。在实际工作中，往往同时采用数学模拟和物理模拟，两者相辅相成，效果较好。

边 克 忠

15. 化工技术开发的若干方法论问题

化工技术的开发，是实现国民经济振兴的重要措施之一。这不仅因为各行各业几乎都离不开化工技术，而且它的变革对积累资金的作用特别显著。毫无疑问，在实现到2000年工农业总产值翻两番的事业中，理所当然应把化工技术的开发放到十分重要的位置上。为了搞好化工技术的开发，应当十分重视方法论的研究。化工技术开发方法论的研究 必将赋于人们以更大的创造性，帮助人们少走弯路，做到事半功倍。

技 术 的 经 济 寿 命

技术在本质上是革命的。它不承认任何现存形式是最后的形式。任何技术都有一个发展过程，开始时总不会那么完善，经过人们的不断改进，才逐渐趋向成熟。这时这类新技术的应用范围就从个别的、少数的企业迅速扩大到整个行业，甚至跨越行业的界限而被用到许多别的行业。但是当发展到一定阶段以后，这种技术的进一步改进常常不能取得明显的效果。随着这种技术改进的可能性逐渐消失，总会或早或迟地出现另一种更为先进的技术类型，这就促使原有占统治地位的、但已日趋陈旧的技术逐渐退出历史舞

台，让位于更为先进的技术。

化工技术同样遵循着上述规律不断地向前发展。以无机化工中几个主要产品的生产为例，在近一、二百年中都经历了多次的技术换代。从利用植物碱到用路布兰法制造纯碱，这是一次技术上的大改变。路布兰法以食盐为原料，而且原料可以综合利用，所以在生产上获得了广泛应用。但是这项技术的经济寿命未过一百年，就被更为先进的氨碱法所代替。然而氨碱法也不是尽善尽美的。于是人们不遗余力地寻找合理的解决方法，终于找到了"联合制碱法"。这就是我国著名制碱专家侯德榜提出的新的制碱方法。

从二十世纪初以来，固定氮技术已经发生三次大的换代。最初采用电弧法；接着是氰化法；不久就被Haber—Bosck法所代替。此法系高温高压及有催化剂存在下直接合成氨。在合成氨工艺中，最近四、五十年中，除氨合成部分没有发生大的变动，其它如原料路线、生产规模、热能综合利用、催化剂和气体净化技术等又都发生了一系列重大改革。然而不管如何改进，工业合成氨必须在高温高压下进行，而且效率总的说来比较低，所以花的代价是很大的。可是在自然界中，自生固氮菌和根瘤菌与高等植物共生后，却可以在常温常压下把空气中的氮固定下来。据估计，全世界每年通过生物固氮所得的氨，远远超过全世界目前氮肥工业的产量。随着遗传工程技术的发展，人们已经尝试把固氮微生物的固氮基因转移到禾谷类作物根际生长的细菌中去，使它具有固氮的能力。另一方面，化学模拟生物固氮技术的研究也已经取得了很大成就。人们已经分离出固氮酶的两种半纯化的铁钼蛋白和铁蛋白；正在逐步摸清铁、钼、硫原子的比例；铁钼蛋白结晶空间结构的研究最近已有新的突破；固氮酶的结构和功能关系的研究有了新的进展；国内外许多学者已经提出了若干固氮模型。所有这一切，都标志着生物固氮的化学模拟的研究已经进入一个新阶段。常温常压下的固氮技术取代高温高压下的合成氨技术，虽然还会有漫长的路，但这已是不可避免的了。

其实只要仔细考察化学工业中的各种技术，即使那些表面上看来似乎不可改变的传统工艺技术，无一不是处在不断地变化之中。就象产品总是在不断地更新换代一样，技术也在不断地更新换代。就象产品有其一定的经济寿命一样，技术也有其特定的经济寿命。任何一种技术都有一定的萌芽期、成长期、成熟期和衰退期。以应用普及率对时间作图，我们将会得出各种技术的经济寿命曲线，如图4.6所示：

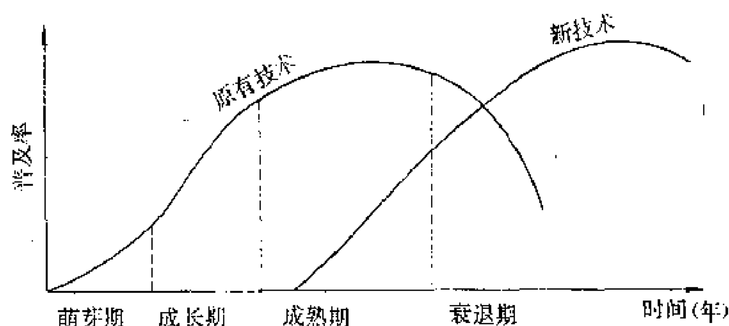


图4.6 技术的经济寿命曲线

现代科学技术以一日千里的速度向前发展，而且以后的发展速度将愈来愈快。随着科学技术的加速发展，技术换代的周期也将越来越短。尤其是在行将到来的新技术革命的时期，技术的更新换代将是极其迅速的。这就要求我们更加重视调查各种技术的普及率，并进而预测它们的经济寿命，及时发现那些刚刚破土而出、正在生长中的新技术。只有这样，才能使整个化工行业始终保持青春的

活力。

技术的纵向转移

正确处理基础研究、应用研究和开发研究三者的关系，对于化工技术的开发，具有极重要的方法论意义。基础研究的目的在于探索新的科学规律，它为应用研究和开发研究提供理论基础。应用研究是基础研究的继续，目的在于开拓新的技术途径，为发展新技术提供技术基础。技术开发是在基础研究和应用研究基础上的进一步发展。新技术只有通过开发阶段，才能进入实用阶段，应用于生产中。

科学转化为技术，通常有两条主要途径，一条是纵向转移，另一条是横向转移。所谓纵向转移，是指安排科学研究的一般次序，从基础研究开始，经过应用研究和开发研究阶段，最后把新技术应用于生产过程。例如人工合成氨取得成功，首先要归结于十九世纪下半期发现的平衡移动原理和催化原理。前者是指一种反应按一定速率生成反应物，反应物又按一定速率还原为原来的物质，经过一段时间后必然会达到平衡。一切化学反应，都与化学反应所处的条件有关，条件改变时，平衡也就会改变。后者则是在深入研究化学反应的历程，搞清楚分子碰撞在化学反应中的作用，提出了"活化分子"和"活化能"的重要概念以后，确认了一个关于催化剂的现代观点。所谓催化剂，是指能改变反应速度，而本身在反应前后的数量和化学性质不变的物质。借助于催化剂来改变反应速度的作用，就叫催化作用。在确立了平衡移动原理和催化原理以后，人们便在这些原理指导下，开始了合成氨的应用研究，确定了氨应在高压高温下进行合成。同时广泛探索了用铁、铂、锇、锰、钼、钨、铀等作催化剂，研究成功了铁系触媒。在开发阶段，又确定了合成氨的压力、温度的最佳条件，选用气体循环的流程。终于在1913年4月，在德国奥堡建成了世界上第一个合成氨工厂。

应该指出，基础研究、应用研究和开发研究是在相互作用中前进的。基础研究和应用研究是技术开发的基础。上述人工合成氨取得成功，它在发展过程中的方向是十分明确的，转移的次序也是极其鲜明的。

当然我们不能作狭隘的理解，似乎化工技术的开发，只是化学的基础研究和应用研究的结果。技术是科学理论的物化，但化工技术不只是化学这一门科学理论的物化。化工技术的开发，不仅受到化学理论发展的制约，而且也受到其它有关学科的影响。如果没有高压技术和冶金技术的开发，当然也就不会有人工合成氨的成功。当合成氨从实验室进入工业化阶段，曾经遇到一个极端困难的问题：高温下一般钢材与氢接触，就会发生氢脆而受到严重的腐蚀。只有当这些问题都获得解决后，合成氨工业才得以真正建立起来。

技术的横向转移

在现代化工中，有一些新技术的开发，并不是依赖新理论的突破，而是在原有理论和技术基础上，运用移植的方法，把另一领域中的比较成熟的技术（即所谓老技术）移植过来，从而变成化工领域中的新技术。同上述纵向转移的路线不同，技术的这种从一个领域向另一个领域转移，称之为横向转移。

例如，把计算机技术移植到化工领域，导致化工生产控制技术的新发展。最近微处

理机已经同化工仪表结合起来，从而导致仪器的智能化，使仪器本身具有了某些人的智能，极大地提高了测量的速度、准确度和可靠性。把激光技术移植到化工中，可以使许多产品的纯度得到极大提高。二氯乙烷热解所得氯乙烯的纯度是不高的，而激光却可以准确地控制二氯乙烷的裂解，从而产生一种差不多完全纯净的氯乙烯。催化剂是化工生产中的重要武器，近些年来制造成功的酶催化剂、电催化剂、光催化剂，很大程度上应归功于技术的移植。

把化工技术移植到别的领域，反过来也会推动化工技术的发展。有许多技术，开始出现在化工领域中，后来把它移植到冶金、原子能、半导体、生物等领域中，不久便在这些传统技术的基础上创造出许多崭新的技术。色层分析技术的先驱是毛细分析，它是在研究有机和无机化合物在滤纸上行为的过程中形成的。但色层分析技术的真正发展却是在研究植物色素的过程中。由于系统地研究了分离植物色素的吸附剂、淋洗液以及吸附柱等有关装置，才为色层分析技术奠定了基础。现在这种技术已经成为制备高纯净化合物、分离和鉴别复杂混合物的一种极为重要的手段。

由此可见，技术移植的作用是很大的，它是技术开发的一种极为重要的方法。技术移植是一种复杂的劳动，绝非是轻而易举的事，靠生搬硬套是不能奏效的。在移植的过程中，要精心研究不同领域的不同特点，要使被移植的技术满足不同生产部门的特殊需要。这样就必然要对原有技术进行修正、充实和提高，甚至要进行一些比较重大的革新。显然这是一种创造性的活动，那种否定移植也包含有创造的观点则是毫无根据的。

长期以来，人们对纵向转移比较重视，而对横向转移的地位和作用认识还不足。随着科学技术的飞速发展，化工技术体系的内容和结构将愈来愈复杂。在这种形势下，技术开发的方法也将日益丰富，并将出现新的特点。今后一个时期化工技术开发的重点，将有可能放在新产品制造技术的综合开发上。所以横向转移的作用也将愈来愈重要了。

近亲技术与远亲技术

在横向转移中，涉及不同领域中的技术，一种是近亲技术，另一种是远亲技术。所谓近亲技术，是那些相邻领域中使用的各种技术。而远亲技术则是指相距甚远，有时甚至看来是风马牛不相及的那些领域中的技术。我们既要重视近亲技术的移植，也要十分重视远亲技术的移植。它们都是技术开发中必须重视的有效方法。

众所周知，十九世纪末德国的染料合成技术居于领先地位，当时世界上的各种染料专利几乎被德国所垄断。二次世界大战期间把大量合成染料技术移植到炸药等军事工业上。战后又把这类技术移植到农药工业上。德国的新农药合成技术在战后发展得极为迅速，在许多方面有它的独到之处，这不能不归结到它原有染料和炸药等工业基础，同时也是和德国重视近亲技术移植分不开的。

近亲技术移植所引起的作用是人们容易看得见的，但远亲技术移植的作用却常常被人们所忽视。其实，远亲技术移植有时能起到意想不到的作用。例如，有谁能想到维生素也可以给塑料"治病"呢？延长塑料寿命有一项十分奇特的技术，这项技术不是来自化工或其它相邻的领域，而是来自生理卫生。近些年来人们研究了多种维生素，吃了维生素，不仅可以治疗有关疾病，而且有延年益寿的作用。把这项技术移植过来，将塑料制品浸泡在饱和的维生素溶液中，让维生素分子渗入塑料表面的细孔，使塑料与周围环

境之间形成一层薄薄的防护层。采用这种技术，对防止塑料老化十分有效，将塑料齿轮、轴承等进行防护处理，其寿命有些会增加二、三倍之多。

在当今的技术领域中，遗传工程技术的移植具有特殊的重要性。将遗传工程技术移植到化学工业中来，其发展前途是无量的。它不仅可以制造激素、干扰素、抗菌素等药物，从而导致制药工业的革命，而且采用这种技术可以分解乙烯、丙烯等有机化合物，生产出乙烯氧化物、乙二醇和酒精等化学产品。而用化学方法合成这些产品通常要在一定温度和压力下进行，因而需要消耗大量的能量。遗传工程技术的移植最终将使能量消耗大的化学反应得以在常温常压下进行。通过这项技术的移植，设计出酶和微生物反应需要的生物反应器。开发这个领域中的化学反应工程，必将使整个化学工业发生革命性的变革。

单项技术与组合技术

有一些新技术，是由比较成熟的技术（老技术）经过组合形成的。单项技术是基础，但组合技术不等于单项技术的简单相加。技术组合是指把有关技术，按照一定的结构，使它们联系成为一个有机的整体。经过合理组合以后，整个技术系统更加协调，各种技术性能得到有效地发挥，从而产生技术系统的整体最优化。显而易见，这也是技术开发的一种重要方法。

在技术不发达的时代，各种技术的组合是比较简单的，在那种情况下，整体常常近似于各个部分的总和。但是随着技术的发展，许多技术系统变得愈来愈复杂，在这些系统中，整体的功能不再是各个部分性能的总和，不能再用简单机械运动的模式来处理这类系统中的问题。所以，愈是复杂的部分，技术组合的重要性也就愈加突出。

在化工领域中，首先应当重视那些能够强化和纯化化学反应的各种技术的组合。直接合成氨所以能取得成功，在相当程度上应该归结于多种技术的组合。如果没有高温技术、高压技术、催化技术，以及这些技术同氢—氮混合气系统反应的结合，就不会有现代的合成氨工业。为了强化反应，就必须高度重视这些技术的组合。同时，在化学反应中，我们总是希望能获得高纯度的产品。为了纯化化学反应，我们可以采用象酶和激光等技术。用酶作催化剂，选择性极强，可以在化合物的特定部位上引进一定的基团，或者破坏某些键，使反应按照预定的目标准确地进行。然而酶是不稳定的，容易受到多种物理、化学因素的影响而失活，而且一般只能在水溶液中进行反应。所以在这里多种技术的组合就显得特别重要。目前工业上已经将微生物方法和有机合成方法结合起来，制造出许多结构极为复杂的有机体。技术组合在这方面的作用是极为重要的。

在化工领域中，工艺上的合理组合具有特别的重要性。化工生产的工艺通常是比较复杂的，工艺组合的最佳化必将极大地提高产品质量，降低能耗，节约原料，简化设备和流程。侯氏制碱法是在氨碱法的基础上发展起来的，但是它却能胜过氨碱法，就是由于把制碱工艺同合成氨工艺巧妙地组合起来的结果。现代大型氨厂之所以能大幅度地降低能耗，使热能得到较好地综合利用，很大程度上也是取决于工艺上的合理组合。

技术组合的方式是多种多样的。但是不管采用何种方式进行组合，都要求通过组合形成一定的技术结构。在这个结构中，有一些技术起着中心作用，我们称它为中心技术。选好中心技术以后，还要注意其它技术的配合，努力使中心技术与其它技术协调一

致，从而形成一个合理的技术结构。这个结构的好坏，将决定着整体的性质和功能。实际上技术组合就是一个立足整体、统筹全局、使中心技术与其它技术辩证地统一起来的过程。实现这个过程，最终将会产生出合理的技术结构，创造出崭新的组合技术。

项 浙 学

（三）著名化学家的科学方法

在化学科学发展的各个历史阶段，都涌现出一批著名化学家，他们不仅在化学上成就卓著，而且在科学方法上颇具特色。由于各个化学家具体从事的专业方向不同，所处的历史条件各异，同时个人的科学素质亦有差别，这就使得他们的科学方法虽有共性，但更具个性。对他们的科学方法，只有深入全面地进行历史考察，才能如实反映其本来面貌，并科学地作出评价。

这里，我们选择介绍几位著名化学家，侧重对他们的科学方法加以论述。限于主客观条件，目前对于历史上著名化学家科学方法的研究，无论在广度上还是在深度上都还存在着一定的局限性。关于化学家们的科学方法的研究，还需要继续深入并进一步提高水平。这方面的研究成果，无疑将丰富化学方法论的研究内容，并使人们从中得到历史的借鉴和启示。显然，这对促进现代化学的研究与教学也是很有裨益的。

1.拉瓦锡的研究方法

拉瓦锡的名字是同十八世纪下半叶的化学革命联系在一起的。人们通常把这场革命看成是拉瓦锡提出燃烧的氧化学说代替了旧的燃素说，但这样讲是不够完全的。化学革命是化学观念的根本性变革，是从整体上推倒旧的理论体系，创立新体系。从这个意义上讲，拉瓦锡的化学革命就不仅仅是燃烧理论的变革，而是整个化学观念其中包括化学基本概念和基本方法的变革。美国科学史家库恩认为，拉瓦锡在普列斯特利看到所谓“脱燃素空气”的地方看到了氧气，他在学会看到氧的过程中，同时也改变了对其它许多物质的看法，例如在当时许多人看到所谓“土”的地方，拉瓦锡看到了氧化物。因此，在发现氧气以后，拉瓦锡是用与燃素论者不同的眼光看待自然界的①。他之所以能做到这一点，是同他的研究方法有关。拉瓦锡对化学方法所作出的贡献，是他的化学革命的有机的组成部分，至今仍然具有一定的启发意义。

系 统 的 严 格 的 定 量 性

系统严格的定量性是拉瓦锡实验方法上的基本特点。

拉瓦锡一开始从事科学研究，就应用了精确的测量方法。他21岁时所做的第一个实验，就是定量地测定了石膏在加热以及冷却过程中水分的变化。24岁时，他在地质勘查活动中又用自己设计的精密比重计研究了法国各地的水的比重。

拉瓦锡早期所进行的重要工作，就是通过严格的定量实验揭示了长时期来流行的所

---

① 托马斯·库恩：《科学革命的结构》，上海科技出版社，1980年，97页。

谓“水变成土”以及“火微粒”学说的谬误。前一种说法是当年赫尔蒙脱依据其有名的“柳树实验”提出来的，后来又得到波义耳和牛顿的赞同①。为了检验这一点，拉瓦锡设计并实施了一个精细的实验。他收集了被认为是最纯净的雨水，并将这些雨水连续蒸馏了八次，然后倒人一特制的容器之中，密封后放在沙浴上接连不断地加热了整整101天结果发现在容器的底部沉积了一些固体渣滓。在某些人看来，这似乎是水变成了土的证据。但拉瓦锡不满足于这类似是而非的定性说明，他要进一步从数量上加以验证。他仔细地称量了加热前后的水的重量、容器的重量，以及水和容器的总的重量（包括容器中残留的一部分空气），终于查明，水和容器的总重量在加热前后丝毫也没有变化，而且密封在瓶中的水的分量也没起变化，只是玻璃容器本身的分量变轻了，而减轻的分量又恰好同固体渣滓的分量相当。这样，拉瓦锡查明了那些残滓来自玻璃容器，从而以这一雄辩的定量证据否定了传统的“水变土”的错误观点。

人们通过长期的冶炼金属的实践，早已认识到在空气中煅烧金属重量会增加。为了解释这一现象，波义耳提出了著名的“火微粒”假说，认为煅烧后金属灰渣重量的增加来自具有重量的火的微粒。为了检验这一假说，拉瓦锡重复波义耳在密封的烧瓶中煅烧金属锡的实验，但他与波义耳不同，在打开瓶子之前对整个密封体系进行了称量，结果发觉整个密封体系在加热前后重量没有变化，这就证明波义耳曾经设想的在加热过程中火的微粒透过玻璃壁进人烧瓶内与金属锡结合的看法是不存在的、错误的。在打开烧瓶时拉瓦锡注意到有空气冲进瓶内；然后对烧瓶和金属锡分别加以称量，发现烧瓶本身的分量未变，而锡的分量增加了。拉瓦锡把这部分增加的分量解释为煅烧过程中锡与瓶中的空气发生了化合作用。

上述拉瓦锡的早期研究，充分体现了他在实验中的严格的定量特征，同时也表明了他对传统观点的批判精神。这些是拉瓦锡研究方法中的突出优点，它带来了丰硕的果实。这些成果同对燃素说的否定一道，构成了变革旧的化学观念的重要环节。

从方法论角度去看，燃素说实质上是一种关于燃烧现象的定性解释。这一学说是基于对火的直接观察而形成的。在进行这种观察时，最明显的现象就是从燃烧物上有火焰迸出，而且，当有机物燃烧时会留下变轻了的灰烬，这就进一步指明在燃烧过程中损耗了一部分物质。根据这种观察，人们就自然地产生了燃烧时会有某种可燃元素逸出的观念。这种定性解释符合人们的日常经验，燃素说一时便流行起来。但燃素说从一开始就面临一个难题，即它无法解释金属煅烧时重量反而增加这一众所周知的事实。早期的燃素论者可以对此置之不理，但晚期的燃素论者自知不能忽视定量证据，为了弥补燃素说的这一缺陷，有人竟设想燃素具有负的重量。当时，牛顿的经典力学观念已被人们广为接受，而在牛顿力学看来，地球上的一切物体由于受到地心引力的作用而具有重量，物质元素也应当是一些具有重量的“物理实体”。由此可见，燃素论者的“负重量”观念，离开近代物理学的思想是多么遥远！

在燃素时期，由于物理学的帮助，化学在实验上发展了气体的测量技术，这使燃素说在定量方面的反常更为严重起来。拉瓦锡通过硫和磷的燃烧的定量研究，揭示出其燃烧产物的重量同金属煅烧时的情形一样，是增加的。在拉瓦锡手中，气体技术已经能

---

① H.S.塞耶：《牛顿自然哲学著作选》，上海人民出版社，1974年，189页。

够确定，物体燃烧或煅烧时究竟增加了多少分量，这些分量又是从何而来的。这些新的材料是定性的燃素理论所无法处理的；尽管燃素论者拼命抵制，而且其定性解释亦显得似乎合理，但终于被拉瓦锡的定量解释所压倒。1777年，拉瓦锡在普列斯特利制得氧气之后第三年，提出了关于燃烧的新的氧化学说，明确指出，燃烧过程是可燃物质与氧的化合过程，燃烧产物所增加的重量，等于燃烧过程中被消耗掉的那部分空气即氧气的重量。显然，这一新的燃烧理论不仅是定性的，而且具有更重要的定量内容，唯有它，才给了燃烧过程以科学的解释。总之，基于对火的直接观察的燃素说没有认识到气体在其中所扮演的角色；而当气体化学诞生之后，燃素论者尽管为气体技术的发展作出了重大贡献，但他们囿于传统的定性理论而排斥了新的定量证据。相反，拉瓦锡吸取了燃素化学所取得的一切积极成果，相信新的定量证据而决然抛弃了燃素说的陈旧的定性内容。因此，从方法论角度去看，氧化说代替燃素说是化学的定量方法，其中尤其是气体测量技术发展的必然结果。

提 出 质 量 守 恒 原 理

拉瓦锡不仅通过严格的定量实验纠正了旧理论体系中的那些错误的定性内容，而且更为重要的是，他明确地提出了质量守恒原理以及关于化学计算的基本设想，为在宏观水平上的化学定量方法奠定了坚实的基础，为十九世纪化学的大发展开辟了道路。早在拉瓦锡以前很久，炼金术士们已经采用过定量方法，但他们做得十分粗糙，尤其是指导思想不对头，因此，他们的定量方法与现代意义上的定量方法相去甚远。在十六世纪，随着冶金化学的兴起，出现了为工艺所需的较为精密的定量方法，天平开始得到广泛应用。十七世纪赫尔蒙脱和波义耳所做的实验，已经具备明显的定量性质，在这类实验中，“物质不灭”或更确切地说“质量守恒”原理已经被当作前提在实验中加以应用。十八世纪的燃素论者进一步发展了气体化学及其测量技术。然而，相对而言，所有这些人都不过是在枝节问题上做文章，而只有拉瓦锡才以理论家的气魄，明确地揭示出化学定量方法所依据的基本前提。在其代表作《化学纲要》一书中，他写道：“由于人工的或天然的操作不能无中生有地创造任何东西，所以每一次操作中，操作前后存在的物质总量相等，且其要素的质与量保持不变，只是发生更换或变形，这可以看成为公理。做化学实验的全部技艺是基于这样一个原理：我们必须假定被检定的物体的要素和其分解产物的要素精确相等。”①

关于水的合成，拉瓦锡说道：“在物理学上和几何学上总量都等于各分量之和，……因此，我们认为水的重量等于形成它的两种气体的重量之和的结论是正确的。”②

可见，拉瓦锡提出质量守恒原理，是基于“无中不能生有”这样一条深刻的哲理，基于几何学上“总量等于它的各个分量之和”这条数学公理。在唯物主义看来，这些哲理和公理，是人类在漫长的实践活动中逐渐形成的信念，是人们头脑中综合地运用归纳和演绎、分析和综合等方法才得到的逻辑结论。拉瓦锡的功绩，就在于把它们移植到化学中来，具体化为质量守恒原理，并用以指导化学反应的研究。

---

① J.R.柏廷顿：《化学简史》，商务印书馆，1979年，132页。

② 陈元祥：“化学发展史（上）”，见《中山自然科学大辞典》，台湾商务印书馆，1976年，131页。

必须指出的是，在拉瓦锡提出质量守恒原理之初，尽管得到了大量实验事实的支持，但也碰到了他当时还无法说明的"例外"情形。拉瓦锡认为，动物的呼吸与物体的燃烧经历着相同的过程，从这一点出发，他测定了人体呼吸时所吸人的氧气的量和所呼出的二氧化碳的量，并将它们同燃烧过程相比较。结果发现人体呼吸所放出的二氧化碳的量，恒少于物体在正常燃烧时由消耗等量的氧所生成的二氧化碳的量。这似乎表明，在呼吸过程中氧的量出现了"亏损"，并不守恒了。这个"例外"要等到很久以后弄清了氧的代谢机理之后才能纳入质量守恒定律的框架。当时，拉瓦锡并没有因为碰到了这个"例外"而对质量守恒原理发生动摇。由此可见，这一原理的提出，与其说是出于他对大量化学事实的归纳，还不如说是出于他对哲学和数学"公理"的信赖。如果说，前面提到的那些有名的实验显示了拉瓦锡的实验家的特色，那么，质量守恒定律的提出则充分显露了他作为理论家的特色。

从质量守恒原理出发，拉瓦锡把化学反应中变化前后的物体列成一个代数式，用以计算物体变化的数量。他在研究了葡萄发酵的过程之后写出了下列代数式：

葡萄汁＝碳酸＋酒精

这可以说是现代化学方程式的雏形，标志着数学方法在化学反应中得到应用。对此，拉瓦锡本人有着深刻的理解："我们可以设想，把参加发酵的物质和发酵后的生成物列成一个代数式，再逐个假定方程式中的每一项都是未知数，然后能逐个算出它们的值，这样一来，即可以用计算来检验我们的实验，再用实验来验证我们的计算。我经常有效地用这种方法修正实验的初步结果，使我能通过正确的途径重新进行实验，直至获得成功。"①

不难看出，这些思想是拉瓦锡从质量守恒原理导出的逻辑结论。在原子分子论尚未创立的时代，拉瓦锡对上述方法的应用自然是受到限制的，尽管如此，他那关于化学计算的思想还是远远地超过了他的同时代人。

批判精神和科学史分析方法

拉瓦锡具有可贵的革命批判精神，这在前述否定"水变土"以及否定"火微粒"学说的事例中已经得到了充分的显露。至于燃素说，远在普利斯特列发现氧气以前很久，拉瓦锡就已经觉察到它有点不对头。因为他从科学史的材料中得到启发，意识到燃烧可能不是象燃素论者所说的那样，是从可燃物中析出什么燃素，而是与此相反，燃烧物体似乎从空气中吸收了什么东西。在思考这一难题的过程中，他的心中已经在孕育一场革命。

拉瓦锡如同历史上那些伟大的科学家一样，是十分重视科学史的。在他送给法兰西科学院的研究报告中，一般都有关于他所研究的课题的清晰明畅的历史综述。在规划其化学革命的过程中，他也充分运用了科学史的分析方法。为了弄清楚物体燃烧时空气所扮演的角色，他曾经研读了前人的大量著作。前面所提到的关于否定"水变土"和"火微粒"学说的实验，也是他从科学史的分析中找到的研究课题。关于燃烧问题，他注意到不同的作者有着不同的解释，有些解释甚至是互相矛盾的。由此，他萌发了要进一步

---

① 莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，162页。

重复别人的实验，以判定其真伪或优劣的欲望。在1772年前后写的一篇日记中，他说道：“当我研究所有从物质中析出或与物质结合的空气的全部历史时，一些不同的解释全部呈现。由于这项研究结果的重要性促使我担任这项工作，这项研究最后可能导致物理学和化学的革命。我认为过去所做的实验仅供参考，有人建议我用新的方法重做这些实验以便将空气从物体中析出或与物体结合的知识同其他知识融合，以形成一项新的理论。”① 这篇日记是宝贵的史料，它充分指明，在拉瓦锡着手从化学的角度对空气进行系统的研究之前，就已经规划着化学上的革新。

拉瓦锡通过金属锡的煅烧以及非金属硫、磷的燃烧等实验，已经认识到煅烧和燃烧时有一部分活泼空气（即氧气）与金属或非金属结合。如果能实现它们的逆反应，即把这种被结合的空气重新赶出来，且想法证实被赶出的空气正是先前被吸收的气体，那么，就可以说找到了关于煅烧和燃烧的新的、统一的解释。正当拉瓦锡苦苦寻求这种逆反应的时候，普利斯特列访问巴黎，告诉了拉瓦锡一个新的发现，即用透镜聚光加热汞的红色粉末（氧化汞）能得到一种助燃的空气（普利斯特列称之为“脱燃素空气”）。这真是雪中送炭，给了拉瓦锡莫大的启迪。他立即重复了普利斯特列的实验，又通过三年的悉心研究，终于查明了这种新发现的气体在燃烧中的重大作用，并命名为氧气，完整地提出了关于燃烧的氧化学说。前面提到，拉瓦锡的氧化学说不仅含有定性的解释（拉瓦锡氧化学说的定性内容中还残留有燃素说的痕迹），更为重要的是含有定量的规定，这一点，在氧化说取代燃素说而实现的这场化学革命中起着极重要的作用。

如果说，在科学上作出新发现的机遇只偏爱那些“有准备的头脑”②，那么更应当说，象拉瓦锡那样能及时抓住科学上的新发现而创立新的理论体系，就更需要有“头脑的准备”了。这种准备，也就是对原有理论的内在矛盾和症结所在要有所觉察，并由此激起解决这类问题的强烈欲望。拉瓦锡正是这样的人。综观他一生的科学活动，充满了生机勃勃的创造气息和批判精神，同时又具备严谨的科学态度，把强有力的逻辑论证和精细的定量观察结合起来，还通晓前辈人所做的工作。凡此种种，是较之他的氧化理论等具体科学成果，更为值得我们继承的宝贵遗产。

确定化学元素概念规定性的归纳方法

拉瓦锡的实证的归纳方法，在他的元素理论中得到了充分的体现。当时，化学界围绕着究竟什么才是真正的元素展开过争论。有不少化学家认为，应当确定哪些物质是真正的元素，并试图将元素和原子的概念结合起来。但拉瓦锡清楚地认识到，在当时要确认什么是真正的元素还不太可能。在他看来，这个问题只能从当时已能达到的实验事实出发在某种程度上加以解决。他说道：“如果我们用所谓元素一词来表示构成自然界的各个简单不可分的原子，很可能我们对那些原子一无所知。但是，如果我们用‘元素’或‘物理要素’来表示我们对于分析（指化学分析）可以达到的最近点的概念，我们必须承认所有可以用分解的方法还原为物体的物质都是元素。”③

按上述原则，拉瓦锡列举了他所认定的33种元素（简单物质）。他承认这是尝试性

---

① 陈元祥：“化学发展史（上）”，见《中山自然科学大辞典》，台湾商务印书馆，1976年，130页。

② 贝弗里奇：《科学研究的艺术》，科学出版社，1979年，35页。

③ 阿·埃利斯：“安图瓦·拉瓦锡”，《科学史译丛》1982年第1期，91—98页。

的，因为其中有一些被认为是元素的简单物质，很可能实际上是由两种、三种甚至更多种简单物质构成的复杂物质。另一方面，拉瓦锡亦强调，在实验还没有给出新的证据之前，我们必须假定它们是简单物质，这样做，在一定范围内并不妨碍化学实验的有效性。他说："既然这些要素不能再分离，或者更确切地说，既然我们尚未发现分离它们的方法，那末，对于我们来说，它们就是简单物质，而且，在实验或观察还未证实它们是混合物之前，我们也不应当这样去猜想它们。"①

科学史家艾克罗伊德认为，这是一种非常卓越的思想方法，它最能说明一个科学家应当如何对待尚未解决的问题。

不错，拉瓦锡是承认原子论的，不少科学家也经常在谈论原子，但当时离从化学上发现原子还有一段距离。如果拉瓦锡不是过早地死去，也许会看到化学沿着他所倡导的方法从实验上找到了原子（道尔顿）。必须承认，关于原子，拉瓦锡没有作更多的哲学思考。事实上，当时还未能为这种思考积累足够的资料。在这种情况下，拉瓦锡所提出的确定元素的方法，不失为一种建立在实验方法基础之上的切实可行的办法。事实上，他所认定的33个元素中，有大部分（23个）是正确的，这也说明了他的方法的有效性。

同现代的化学元素概念比较，拉瓦锡的元素观念自然是粗浅的，但它代表了人类元素思想发展的一个阶梯。同样，拉瓦锡确定元素的思想方法，固然有其合理有效的一面，但也有其不足之处。他忘记了，为了从实验和观察上发现那些被误认为是元素的复合物质，必须首先从思想上对它们加以猜想或怀疑。

拉瓦锡研究方法的影响与时代性

以上我们从四个方面叙述了拉瓦锡研究方法的若干特点。由上述分析可知，拉瓦锡具有理论家和实验家的双重素质，但更偏重于理论色彩。他所做的实验，一般说来都是重复别人已经做过了的。但他作为理论家，却具有比别人更为深邃的洞察力和更为敏锐的眼光，善于运用理论思维，发挥逻辑推理的力量，补充并加强别人的实验，并最终获得对实验结果的正确解释。

拉瓦锡的定量原理和方法给化学的发展带来了深远的影响。拉瓦锡的质量守恒原理是在1789年提出来的，此后仅十年的时间内，就接连发现了当量定律和定组成定律。再过二、三年之后，道尔顿就提出了原子论和倍比定律。十八世纪末十九世纪初期化学的飞跃发展，尽管有多种因素，但拉瓦锡的化学革命尤其是他所倡导的定量方法的普遍采用，不能不认为是重要的原因之一。上述三个物质化合量的基本定律以及道尔顿的原子论，都是应用化学定量方法所获得的硕果。

严格说来，一门科学只有当它达到了定量研究的阶段，才真正称得上是科学。在拉瓦锡之前的一切化学理论，都还只停留在定性阶段，其中的科学性是十分有限的。只是在拉瓦锡引进定量方法，创立了具有定量内容的物质的氧化学说之后，化学才实现了自身的革命，才被真正作为一门科学去加以研究了。

毋庸置疑，拉瓦锡的化学革命是有一定的时代背景的。就科学体系内部来讲，物理学的思想和方法对化学的影响是十分巨大的。实现了近代化学革命的是拉瓦锡和道尔

---

① 阿·埃利斯，"安图瓦·拉瓦锡"，《科学史译丛》1982年第1期，91—98页。

顿，而实现近代物理学革命的是伽里略和牛顿。拉瓦锡必定出现在牛顿之后，道尔顿创立原子论受到过牛顿思想的强烈影响，也是很自然的。拉瓦锡的化学革命也是这样。

牛顿物理学思想对拉瓦锡的影响有以下三点：

（1）牛顿关于“物理实体”的概念使化学的元素观念更为实际，更为具体化了。牛顿认为，组成一切物体的最小微粒都具有广延性（大小）、坚硬性、不可入性、运动性和惯性（即质量）等基本属性。拉瓦锡接受了牛顿的观点，把化学元素看成是一些实在的、具备物体诸基本属性的化学“简单物质”。由此他认为，如果存在燃素这东西，那么就应当在他的天平上称量出来。与拉瓦锡相反，燃素论者却置明显的定量事实于不顾；这表明他们束缚于传统的脱离了“物理实体”的旧的元素观念，而排斥了近代的物理学思想。

（2）牛顿的科学归纳法思想在拉瓦锡的元素定义中得到了巧妙的运用。牛顿说过：“在实验哲学（即自然科学）中，我们必须把那些从各种现象中运用一般归纳导出的命题看作是完全正确的，或者是非常接近正确的；虽然可以想象出任何与之相反的假设，但是在没有出现其他现象足以使之更为正确或出现例外以前，仍然应当给予如此的对待。”① 拉瓦锡在寻找化学元素的过程中运用了牛顿的思想方法，他把当时用化学方法所无法分解的物质列为元素，而且认为，尽管我们可以想象这些元素有朝一日也许会被进一步分解，但是在那一天到来之前，我们仍然应当将它们视为元素。这样做，既可避免陷于无谓的争论，在实验中也无多大妨碍。

（3）拉瓦锡的化学定量方法实际上是物理学方法在化学中的应用。拉瓦锡一开始从事科学研究，就十分重视对物质变化的定量测定。在拉瓦锡时代，化学定量方法主要是重量方法，而重量，或者说质量，正是牛顿经典力学的核心概念。阿西莫夫曾经认为，科学理论有适应一定时代的思想方法的倾向。他举例说，在古代希腊，人们推崇几何学，因此希腊人关于元素或原子的思辨，就带上几何学色彩。他们把原子的几何形状作为它的基本属性，如认为火的原子呈锯齿状，所以会刺伤皮肤，而水的原子是圆球状，所以容易流动，如此等等。牛顿的物理学把物体的质量提到首位；道尔顿把质量应用于原子，创立了原子量这个新的概念；而门捷列夫则进一步把当时已知的六十多种元素按原子量大小排列起来，发现了元素周期律。拉瓦锡作为道尔顿的先驱，首先将物理学的方法引进了化学，使用天平，对化学过程进行定量的测量。美国化学史家莱斯特说：“拉瓦锡的研究领域主要是化学，可是实际采用的却是物理学家的方法。”② 这些方法带来了化学革命的伟大成果。

闵 龙 昌

2. 道尔顿的研究方法

英国化学家道尔顿作为近代原子学说的奠基者，把模糊的原子假说变成科学的原子理论，他的贡献是永垂科学史册的。如今，在追溯道尔顿原子论由来的基础上进一步对

① H. S. 塞耶：《牛顿自然哲学著作选》上海人民出版社，1974年，6页。
② 莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，154页。

道尔顿的科学方法作一历史考察，可以从中得到有益于我们今天从事化学研究的方法论方面的启示和借鉴。

气 象 观 测 与 化 学 实 验

在道尔顿的科学生命之树上结出的是理论硕果，但是它的根是深深地扎在观测与实验的土壤之中。

从1787年起，道尔顿坚持气象观测，并作气象日记持续达57年，从未间断。全部观测记录超过20万款目。1787年3月24日揭开了道尔顿气象日记的第一页，上面记载着他对“北极光”的观察与思考，并写着：“由于我在前进过程中常因相信别人的结果而被引入岐途，我决心尽量少写一些，除非我能够用我自己的实验加以证实。”① 可以说，道尔顿的科学研究工作是从1787年对大气的观测和进行实验性的研究开始的。后来，当他的研究重点从气象学转入化学领域时，对观察与实验方法的重视一如既往。在《化学哲学新体系》一书中他重申：“过去总是认为别人的结果是正确的，在前进中常被引向错误，我决定除用我自己的经验证明以外，尽量少写。由于这个缘故，在化学基本元素这部分，原始的事实和实验将比任何其它内容占有更多的篇幅。”同时，道尔顿指出，重视实验并不是罗列全部实验的细节，关键在于对实验的分析。他明确表示：“我的意思不是说，把我（实验工作）笔记簿的记录抄下来，这样做同没有任何实验的写作是同样应该受到指责的。熟悉化学实验的人们都知道，在五个新实验中适宜向人们作报告的不会多于一个，其它实验通过适当的思考就会发现这样那样一些缺点，它们的用处只是在于它们能指出错误的根源和避免错误的方法。”②

任何设想，在被实验证实以前，还纯粹是一个假设。道尔顿对此意识是相当强烈的，无论是对自己的设想、观点和结论，还是对他人的设想与推论，总的来说均坚持同一看法：“我则在我自己的经验使我确信以前，保留着某种程度的怀疑。”③ 原子的客观存在和具有重量并不存在于道尔顿的思辨和臆测之中，而是他通过气象观测的事实和大量的化学实验所作的推论。

应该指出：道尔顿从未声称他是原子学说的第一个提出者。德谟克利特、牛顿以及波义耳早就提倡过，但是道尔顿的原子论同以往的原子学说存在着本质的区别。以德谟克利特为代表的朴素原子论和以牛顿为代表的机械原子论有着一个共同点，即认为原子乃是一些大小不同本质相同的微粒，并属臆测。而道尔顿虽然受到牛顿观点的影响，但他不是一个单纯的牛顿学说的信奉者。道尔顿充分利用了他在气象观测和对大气组成与性质实验研究方面的成果，得出结论：不同元素的原子它们的大小、重量是各不相同的。每种元素的原子都以其原子量为基本特征；并指出，原子的绝对重量难以测定，但它的相对重量是可以实验测算的。道尔顿十分强调：“指出单质或化合物中终极质点（即原子——作者注）的相对重量以及组成复合质点时简单质点的数目”是建立科学原

---

① 译自*The New Encyclopedia Britannica*，原载*Memeorogical Observations and Essays*(1793).

② John Dalton, *A New System of Chemical Philosophy*, Manchester, Vol.1 (1810) (Introduction).

③ John Daltom, *A New System of Chemicbl Philosophy*, Manchester, Vol.2, p. 296 (附录) (1827).

子论体系所要达到的重大目标 。

为了实现这一重大目标，道尔顿付出了艰巨的劳动，他不仅自己动手做各种实验，测算各种不同元素原子的相对重量，而且还考察其他化学家们的大量实验数据，终于在1803年制定了第一张原子量表。该表最早记载在道尔顿1803年9月6日的工作笔记上，后于1803年10月21日在曼彻斯特文学哲学会上宣读论文《论水对气体的吸收》时公开发表②。此后，道尔顿一直没有停止过对原子量的测定与修订工作。

限于实验条件和误把有些原子的当量作为原子量等历史原因，尽管一再经过校订，道尔顿测算的原子量与现在通用的原子量相比，数值上误差仍然很大。但是，毕竟从此开始，人们对物质结构的一个重要层次——原子的认识，开始建立在科学实验的基础之上；正由于道尔顿首次提出测定相对原子量的任务并把原子量概念引入化学，才使化学真正走上了定量科学的发展阶段。

此外，值得注意的是，道尔顿着手研究问题的典型方法，通常包括两个明显的步骤：通过严密观察先收集事实、进行类比，直到得出一般规律，接着立即用设计好的实验来检验或者寻求同他经常保持通信联系的几乎所有同行或朋友的意见，并注意他们在这方面的经验。这一典型方法在道尔顿发现分压定律和倍比定律的过程中是被运用了，并取得了卓著的成效。

历史地考察道尔顿的观测与实验方法，指出它的缺陷之处也是必要的。道尔顿对同时代化学家们的实验数据及结果是相当关注的，但他更强调自己的经验。过分的自信、偏重于自己的不完全经验，使他对他人的某些科学事实和结果采取了不必要的怀疑态度，尤其当这种实验结果跟他的理论观点发生矛盾时更是如此。对法国化学家盖·吕萨克的气体反应体积简比定律及其实验基础所采取的态度就是个典型。根据盖·吕萨克的实验研究（1808年），一体积氮与一体积氧化合生成两体积氧化氮（NO），而由道尔顿的原子论观点看来，一个氮原子与一个氧原子正好生成一个氧化氮复合原子。道尔顿需要解释这个矛盾，他明白他不能使盖·吕萨克的结果适合于他的原子论，但他必须作出抉择：要么修改他的原子理论，要么摒弃这位法国化学家的结果，二者必居其一。道尔顿拒绝承认盖·吕萨克定律实验基础的可靠性，他认为，气体在任何情况下并不是以相等的或者精确的容量相化合；如果有时候出现该种情况，那也是由于我们实验的不精确③。道尔顿的这种缺陷，后来直接影响到他对阿佛加德罗分子假说所取的否定态度。

建设性想象与原子理论

作为一个努力不懈的科学探索者，道尔顿具有从大量观察和实验数据中善于概括出理论来的不寻常的才能。他的科学研究方法具有把观察与思考，实验的积累与巧妙的理论构思相结合的特色。

这一特色，在道尔顿从观测气象开始到概括出原子论来的整个过程中反映得十分明显。化学史实已经证明：道尔顿是从气象观测出发，进而研究空气的组成、混合气体的

① John Dalton, *A New System of Chemical Philosophy*, Manchester, Vol. 1, p.212—213 (1808).

② John Dalton, *Mem. Literary Phil. Soc. Manchester*, 〔2〕 1, p.271—287 (1805).

③ Bernard Jaffe, *Crucibles: The History of Chemistry*.

扩散和分压，总结出气体分压定律，推论出空气是由不同大小与重量的原子所组成。再通过化学实验，运用原子概念从气象学、物理学领域转入化学领域，把相对原子量引入化学研究并经严格的逻辑推导，逐步建立起了科学的原子论体系。1810年1月27日在曼彻斯特文哲会的演讲手稿中，记载着道尔顿对这一实验研究和理论思维过程的回顾①。从方法论的角度追溯这段历史，可使我们对具体了解道尔顿研究方法的特色会有所裨益。道尔顿首先指出："由于长期做气象记录，思考大气组分的性质，我常常感到奇怪，为什么复合的大气、两种或更多的弹性流体（即指气体和蒸汽）的混合物，竟能在外观上构成一种均匀体，在所有力学关系上都同简单的大气一样。"②接着，他分析比较了牛顿的原子相互排斥的理论和贝托雷（Berthollet）的大气化学结合假说。指出牛顿的观点有着时代的局限，没有考虑到大气是由几种比重不同的气体所构成，而贝托雷用化学亲和力来解释大气是个均匀体、它与高度无关，也是值得怀疑的，因为"当一种气体和另种气体混合时，并没有明显的化学结合的迹象，这种亲和力是很微弱的，而不是象在其它大多数场合下所看到的那样激烈。"③观察和实验事实证明了这一点，但道尔顿并没有轻易否定这种假说的观点，他还要继续思考。

"为了使这种大气的化学结合假说符合或适应牛顿的原子相互排斥的理论，我开始在纸上书写氧、氮和水的原子，陆续地把它们相互结合并在它们周围施加以热的作用因素……"④。道尔顿设想是否可把牛顿的原子相互排斥的观点与大气的化学结合的见解协调起来，从而能够解释大气混合组成的均匀性。他借助于独创的化学原子符号和图式来展开这种设想。结果他发现这样协调处理的结果会导致整个混合气体的比重和氮的比重相同。道尔顿深知："这种情况是一刻也不能允许的，因为这不符合观察到的现象与实验的事实。"这时，他终于完全放弃了大气的化学结合假说，并代之以另一种假说："即把每个水原子、氧原子和氮原子均附加以热，使它们分别成为排斥的中心，在混合状态如同在单独状态时一样。"⑤也就是说，每个原子都能排斥其它原子。但道尔顿很快察觉到：这种假说，当氧已经在最下面，而水在上面时，仍然是无用的。如何阐明混合大气的均匀性仍然面临着理论上的困难。

1801年，道尔顿又提出一个新的假说，以求摆脱和避免这种困难，他说："按照这个假说，我们将设想，一种原子只能排斥与自己相同的原子，而不能排斥其它种类的原子。这种假说对说明任何气体在另种气体中的扩散最为有用，不管它们的比重怎样；而且亦能使气体的任何混合物与牛顿的理论完全协调一致。"⑥ 但与此同时，道尔顿意识到，这种假说仍有不妥之处，具体表现在：气体有多少种就要假定有多少种不同的排斥力，这就失去了统一性；其次，还要假定——热在任何一种情况下都不是排斥力，而这肯定是不大可能的；此外，道尔顿还指出："我从一系列实验里发现，气体相互扩散是一个缓慢的过程，需要很大的作用力"⑦，而上述假说对这种现象的说明是不适合的。

那么，原因又何在呢？道尔顿又陷入了沉思："在思考这个问题时，我发觉我还没有考虑到在弹性流体中质点大小不同的影响，……而如果大小不同，则按照排斥是热这个假说，大小不同的质点在彼此接近时就不可能建立平衡。"⑧ 这就是说，不同种类的

---

①—⑧均见 Roscoe, *John Dalton and the Rise of Modern Chemistry*, p.131—136 (1901).

气体它们原子的大小都各不相同的话，那么由这种大小的不同所产生的不平衡才是造成混合气体均匀性的重要推动力。——这是道尔顿的独特见解，也是一种巧妙的构思，它是在1803年被提出的。道尔顿由此推论："所有不同种类的气体它们原子大小都各不相同"；同时他指出："我们的目的就是测定在一定体积内原子的相对大小和重量，以及它们的相对数目。这就引导到气体的化合以及参加化合的原子 数 目。" ——我 们 知道，正是沿着这条思路的逻辑发展，结合大量的实验工作，道尔顿发现了倍比定律并建立起原子论的体系。

从以上关于道尔顿科学研究特色的分析中，我们强烈地感受到：他具有极其活跃的想象力，惯于用具体的形象和图式来描绘神秘的自然力，例如把原子符号化、图式化。在他的想象中作为"终极质点"的原子是以数学的准确性有条不紊地排列着，而它们的不同组合和变动能解释任何发生的现象。英国物理学家丁铎尔曾经这样说过："有了准确的实验与观察作为依据，想象就成为自然科学理论的缔造者。……从化学 的 事 实 出发，道尔顿建设性的想象形成了原子学说。"[2] 这种建设性的想象是创造性思维的可贵品质，道尔顿在科学研究上的特色是和他富有这种可贵品质是分不开的。

一般来说，在科学研究中，并不是在经验材料十分完备以后才去开始构思其内部机制的图景。当科学研究的问题或目标明确以后，就可开始根据已经收集到的资料和线索进行想象了。在整个研究过程中，不断提出一个个设想，又一次次地在实验 中 予 以 检验。可以说，在科学研究中，想象始终激励着人们去探求事物的底蕴。道尔顿把模糊的原子构思变成愈来愈清晰的原子论图景，就充分表明了这一点。此外，在进行想象时，常把设想具体化，在头脑中构成形象，从而更易于理解和把握，并进一步激发想象。道尔顿就是把原子符号化、图式化，从而提供了用符号和式子在定性和定量两方面表明任何一种化学物质的可能性，并且它还提示了：原子在化合物的排列能够用图式表示，以指示化合物的实际结构。

在这里，令人颇感兴趣的还有：尽管道尔顿的实验技术并不是一流的，他的不少自制仪器亦较粗糙，所得实验数据并不很精确，何况他又有色盲这种生理缺陷。然而这一切都没能阻挡住道尔顿对真理的探索。一种渊源于科学实践基础，通过勤奋自学、独立思考而获得的异乎寻常的洞察力，使得道尔顿有可能从存在缺陷的数据得出 正 确 的 结果；使得他能抓住由实验提供的线索、运用思维去把握原子的存在与运动，从而引向真理的发现。对此，有人极表赞赏，认为道尔顿似乎是用他的手开始做实验，然而却是用他的头脑来结束这些实验的[3]。作为一个化学研究工作者，自觉地培养自己具有道尔顿这种用头脑来结束实验，用思维来把握本质的科学素质是很有实际意义的。

在肯定道尔顿的那种建设性想象或创造性思维的同时，我们亦应看到，他的某些想象、设想或假说存在着一定的主观随意性或臆测。其中比较突出的是反映在他确定化合物组成的"组合原则"上。例如，根据他规定的原则之一是"如果两物体化合时只得出

---

① Roscoe, *John Dalton and the Rise of Modern Chemistry*, p.131—136 (1901).

② David H. Killeffer, *How did you think of that? an introduction to the scientific method* (1973).

③ Roscoe, *John Dalton and the Rise of Modern Chemistry*, p.131—136 (1901).

一种化合物，我们必须假定这种化合是二原子的，除非有某种相反情况的原因出现。”[①]这就是说，如果两种元素的化合物只有一种，便可设想是一个原子与另一个原子的结合。事实上，这种假定对化学事实来说是没有普遍意义的，谈不上是什么组合原则。相反，它却导致了对水、氨等化合物结构组成的错误观念。之所以会如此，是因为道尔顿的这些原则更多的是以物理性质，而不是以化学性质为基础的。因此，当他主观地把这个所谓化合物组成是按最简比例开始相结合的原则应用到化学事实上去时，就不能不导致明显的错误 。

对化学运动的辩证思维

道尔顿不仅具有可贵的科学素质，而且还具有相当深厚的哲学素养。因此他的科学思维方法还含有深邃的哲理性，这一点突出地表现在：他的理论思维中包含着丰富的哲学思维内容。这也可说是他科学研究方法的另一特色。

道尔顿认为：“具有重量的物体除去普遍具有这种或那种吸引力外，我们发现，在我们认识的各种物质中还有一种力作用着，这种力也是同样普遍的，这是一种排斥力。这种排斥力是热的功能，我认为是合适的”，正是“这两种巨大的相互对立的吸引和排斥的力量”通过相互制约、相互“调节使得三种不同的状态——弹性流体、液体和固体能够出现。”[③]很明显，道尔顿把吸引与排斥的对立统一作为自然界的一种普遍矛盾来看待，并结合原子论用以阐明物质的三态转化和气体的性质，并取得了相当的成功。

当道尔顿的研究领域从气象学、物理学转入化学领域时，他对上述观点又作了进一步的阐发与应用。他指出：“一切具有可感觉到大小的物体都是由极大数目的极其微小的质点或原子所构成，它们借着一种吸引力相互结合在一起……我的目的不是对这个结论提出问题，而是在于指出，直到现在，我们还没有用到它，由于忽视这一点，使得人们对化学作用的观点变得非常模糊。” ——道尔顿的这种说法是符合实际情况的。有人说，“原子论”是古老的，这是事实；但是，在道尔顿以前却没有一个人用过原子的观点来科学地解释化学的现象，这也是事实。需要指出的是道尔顿他是作为一个具有哲学头脑的化学家去阐发物质的化学运动的。

具体来说，他是这样来阐发的：“化学分解和化学结合只不过是把这些终极质点或原子彼此分开又把它们联合起来而已。在化学作用范围内，物质既不能创造也不能消灭。要创造一个氢原子或消灭一个氢原子，犹如向太阳系引进一颗新的或消灭一颗原有的行星，一样的不可能。我们所能进行的一切变化无非把处于化合状态的原子分开和把分离的原子联合起来。”[⑤]在当时的科学历史条件下，道尔顿能如此简洁地把物质化学运动的内在矛盾概括出来，确是难能可贵的。如果我们的化学工作者能够效法道尔顿，结合自己的业务实践，提高自己的哲学素养，那么对化学运动辩证内容的思考是会

---

① John Dalton, *A New System of Chemical Philosophy*, Manchester, Vol. 1. 1808 and 1810. p.212.

② 莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，170页。

③ 同①，p. 143—144 (1808)。

④ 同上，P. 141—142。

⑤ 同上，p. 212。

颇有益处的。

此外，在如何运用归纳和分析的逻辑思维方法于化学研究中，道尔顿亦有他的独到见解。1807年，他在爱丁堡的一次演讲中指出："在研究过程中我发现一些新的重要的事实和资料，并把这些事实归纳为定律。这些定律如果能够成立，在化学方面无疑将产生极其重要的变化，将使整个化学成为一门非常简明的科学，连最普通的人都能理解。"① 可见，道尔顿是相当重视归纳法的。但他也看到，单纯运用归纳法还不能对规律性的现象作出科学的说明，正如单凭观察所得的经验，是决不能充分证明必然性一样。如果沿用经验的化合物的百分率计算法，则连化合物中存在的倍比关系也不可能看出，更谈不上对倍比定律作科学的说明。

道尔顿对于这种状况提出自己的见解，他认为："在一切化学研究里，人们都正确地认为，弄清化合物中简单成分的相对重量是一个重要目标。不过，不幸的是，过去化学研究就停止在这里；人们本来很可以从物质的相对重量，推出物体的终极质点或原子的相对重量。从而再导出在各种其它化合物中原子的数目与重量，以帮助和指导我们未来的研究和校正研究的结果。"② 道尔顿的这种有分析的见解告诉人们，停留在用百分率计算法得出的化合物相对重量数据上，用归纳法是得不出倍比定律的，只有运用"原子"概念去分析化合物的成分及其相互的联系（这里还有演绎在起作用）才能发现倍比定律，并加以科学的说明。这种归纳和分析的有机结合，对化学研究来说是有普遍意义的。一般来说，化学是相当重视经验归纳的，这是它的传统特点之一，应该继承发扬。但是随着化学从定性向定量、宏观向微观、静态向动态、描述性向推理性的过渡，对思维分析提出了更高的要求。因为只有通过分析，我们才可能发现化学的基本过程并不是以纯粹的形式出现，而是被各种各样的次要过程掩盖住了。为了寻找化学运动过程的底蕴，就必须暂时撇开这些对主要过程无关重要的次要情况，只有这样才能深入本质，发现化学运动过程的内在联系。从这个意义上，我们可以说：思维的分析可以达到实验分析尚未达到的广度和深度。这说明作为逻辑思维方法的分析，在感性认识到理性认识的飞跃中有着重要作用，这种重要作用随着现代化学的发展将越来越被化学工作者所重视。

考察道尔顿的哲学思维内容，还可看到他对物质可分性问题，有着他自己的见解。在以往有些化学史和自然辩证法工作者中存在有这样一种观点，认为："道尔顿主张原子是组成物质的'最后质点' '终极质点'或'不可破质点'，因而否定了物质的无限分割性及其不可穷尽性，否认了任何物质都是矛盾的统一体。"③ 实际情况是否这样？道尔顿在《化学哲学新体系》中指出，"我们所说的基本元素，或简单物质，是指那些不曾被分解的，但能与其它物质化合的一些物质。我们不能说，任何一个叫做基本元素的物质是绝对不能分解的；但是在它能够解析之前，它应该被称为简单的。主要的简单物质有氧、氢、氮、碳、硫、磷与金属等。"④ 在1810年1月30日，道尔顿的讲演手稿

---

① Roscoe, *John Dalton and the Rise of Modern Chemistry*, p.166—167 (1901).

② John Dalton, *A New System of Chemical Philosophy*, Manchester, Vol.1, p.212—213 (1808).

③ 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，99页。

④ 同②，p. 221—222 (1810).

中记载着："我是认为，有相当数目叫做基本元素的东西，它们不能通过我们所能控制的力由一种转变为另一种。然而，我们应该运用各种方法尽量减少这种元素的数目。我们毕竟还不知道哪些元素是绝对不可分解的，哪些则是难于驾驭，我们还未能采用适当方法使它们还原。"[①]——可见，道尔顿并没有强调作为基本元素的原子是不可再分的物质质点。

诚然，道尔顿也说过："物质虽然极度分散，但却不是无限可分散的，即分散到某一点就不能再分下去。这些物质的终极质点的存在是不容怀疑的，虽然这些质点可能太小，即使以后显微镜改进时也未必能看见。" 但是，联系道尔顿的关于"在化学作用范围内，物质既不能创造也不能消灭"的观点，若综合考察一下他对物质可分性的看法。那么，他的基本观点这样来表述是否更符合实际，即在化学中，物质的可分性是有一定极限的，这个极限就是原子，超出了这个极限，物质再不能起化学作用了。

当然，由于受牛顿机械原子论的影响，道尔顿当时还不理解原子和分子的区别，以致怀疑分子的客观存在，使他在物质可分性的观点上存在着一定的局限性，这是确实的。但是，由于生产、实验等历史条件的限制，使他不能预见到原子的可分性，而认为道尔顿是"否定了物质的无限分割性及其不可穷尽性，否认了任何物质都是矛盾的统一体。"——我们认为，这种观点是片面的，也是苛求于前人的。须知自然科学发展到什么程度，科学方法就发展到什么水平。我们不能离开自然科学发展的实际状况去分析、评判某人某事在方法论上的功过与得失。总之，对化学家方法论的历史考察是和对化学发展史实的深入研究所分不开的。在这方面有着大量的课题值得我们去探讨，开展这方面的课题讨论，无论是对化学史的研究，还是对化学科学本身的发展均有一定的促进作用。

盛 根 玉

3. 范霍夫的研究方法

荷兰化学家雅科布·亨利·范霍夫是十九世纪下半叶成就卓著的一位科学家。他长期从事有机化学结构理论的研究，为立体化学理论奠定了基础。他又是物理化学的开拓者，在溶液理论的研究方面，在化学热力学和动力学的发展中，做出了不少开创性的工作。这一系列的杰出成果，使他成为全世界第一个诺贝尔化学奖的获得者。

范霍夫之所以能够高于前人和他的同时代人，得到这样崇高的荣誉，原因很多。其中一个重要原因是他毕生重视自己哲学素养的提高，从而具有较科学的研究方法。

范霍夫在学生时代除了学习化学以外，还喜欢数学，尤其是微积分。他酷爱哲学，最初信奉法国资产阶级实证论，埋头钻研奥古斯特·孔德的《实证哲学教程》。他对法国人泰纳（Taine）的《智力论》一书很感兴趣，仔细地阅读过惠韦尔（Whewell）所著的《归纳科学的历史》，甚至其父老范霍夫对拜伦诗篇的热爱也深深地感染着他。博览群书和浓厚的哲学兴趣使年轻的范霍夫逐渐地学会了从哲学上来看待生活中的各种现

---

① Roscoe, *John Dalton and the Rise of Modern Chemistry*, p.136—137 (1901).

② 同上，p.137.

象，学会了以科学的研究方法去观察、分析和认识形形色色的变化万千的自然现象，这使他在以后的科学生涯中受益不浅。

实验方法作为研究化学的最基本方法

范霍夫与大多数自然科学家一样，重视实际，看重经验。他坚信自己所研究的对象是客观存在的，人们只能通过自己的实践活动认识复杂多变的自然奇景。范霍夫这一唯物的自然观是自幼逐渐养成的。中学时代的范霍夫，年龄在15岁左右就热爱化学，喜欢做实验。他经常在放学以后或假日里，偷偷地溜进化学实验室做实验。少年的好奇心，趋使他特别乐于选择那些危险的易燃易爆和剧毒品来做实验，后来被学校发现后，予以查禁。范霍夫毫不气馁，争得了家庭的支持，把早先用作父亲医疗室的一个房间，改成了他的专用实验室。

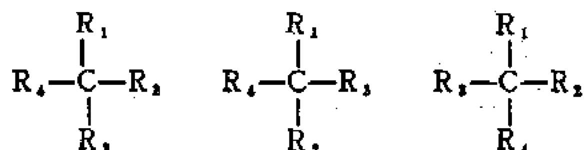
年轻的范霍夫为了在实践中深入了解他在大学里所学的理论知识，曾走进了一家糖厂参加实际生产活动。结果发现书本上的理论往往与实际情况并不完全符合，从而进一步坚定了他通过实验方法进行科学研究的决心和信心。

为了提高自己从事科学实验的能力，范霍夫先后到波恩和巴黎，在凯库勒和武兹的实验室里工作，受到这两位化学大师的直接熏陶。范霍夫把很大一部分精力集中于培养自己的实验技能，这对于当时以实验为特征的化学来讲，具有特别重要的意义。在范霍夫看来，没有先进的实验手段，就不会有深入的化学研究。为了争取一个比较好的实验条件，1887年他远离祖国，受聘去莱比锡大学担任物理化学教授。直到他梦寐以求的研究所大楼建成，具备了从事实验的条件，他才回到了阿姆斯特丹大学任教和开展化学研究。

范霍夫一生中每一项重大的科学成就，都与他非凡的实验才能分不开。例如，1874年初，他到巴黎武兹实验室工作，与法国的勒贝尔一起从事实验。在巴斯德、威利森努斯等人对有机化合物旋光异构现象研究的基础上，范霍夫通过反复实验与观察，研究了乳酸、天门冬氨酸、天门冬酰胺、苹果酸和酒石酸的旋光性。同年九月他与勒贝尔分别提出了碳的四面体构型学说。范霍夫创造性地提出了“不对称碳原子”的新概念。他指出，由于人们不了解原子的实际位置，所以原有的化学结构式不能反映出某些有机化合物的异构现象。比如，若组成分子的诸原子，同处于一个平面上，那么碳原子的四个价是指向彼此相互垂直的四个不同方向上。因此，甲烷衍生物象$CH_2(R_1)_2$类型的，就应有二个异构体：

$$\begin{array}{c} R_1 \\ | \\ H-C-H \\ | \\ R_1 \end{array} \qquad \begin{array}{c} R_1 \\ | \\ H-C-R_1 \\ | \\ H \end{array}$$

；而象$C(R_1R_2R_3R_4)$一类的，应有三个异构体：



范霍夫通过实验发现，实际上并没有这么多异构体。他仔细分析后又设想，如果碳原子本身处于一个四面体的中心，它的四个价分别指向四面体的各顶点，则$CH_2(R_1)_2$

类型的化合物就没有异构体，C（$R_1R_2R_3R_4$）型的只有两种。这样就完全符合实验事实了。于是，范霍夫指出：假如一个碳原子的四个原子价被四个不同的基团所饱和时，可以得到仅有的两个不同的四面体，它们彼此互为对方的镜象，二者是不能叠合的两个立体的异构体。他称这种与四个不同基团相结合的碳原子为“不对称碳子。” 这一成就为后来立体化学的创立奠定了基础。又如，在化学动力学研究中，他从大量的实验事实出发，分清了单分子反应、双分子反应和三分子反应，并且进一步区分出反应分子数与反应级数是不同的概念，这些都具有重大的理论意义。

为了提高实验效果，1882年2月范霍夫曾邀请瑞典的阿伦尼乌斯来到阿姆斯特丹大学的实验室，共同进行实验，研究溶液冰点降低等课题，取得了许多重要成果。这些实验成果既弄清了渗透压公式中i值的意义，又为阿伦尼乌斯的电离理论提供了实验根据。

唯物主义自然观使范霍夫非常重视经验，热爱实验工作。然而他也懂得，如果一个化学家，缺乏用以说明自然现象本质和探索它们的规律性的理论知识与科学想象，那么单凭实验方法本身是说明不了什么问题的。范霍夫经常讲，把理论知识与实验相结合，是他从事科学研究工作的重要原则。

数学方法是研究化学的重要工具

在这方面，范霍夫曾经受到孔德在方法论方面的某些观点的启示。比如，孔德认为：“如果从学术的观点上看，化学对于数学乃至对于天文学的直接关系不太显著的话，那么，从化学对于方法论的关系来看，就完全不是这样了。从方法论上看，详尽地了解数学，对化学家理解化学本身将会起决定的作用。”[2] 范霍夫为了研究数学，特别是关于微分和积分的运算，他慕名到莱顿大学受教于一些著名的数学家。青年人的坚强意志和苦干精神，终于使他在1874年12月通过论文答辩，获得了数学博士和自然哲学博士学位（他的博士论文题目为《对于醋酸和丙二酸认识的贡献》）。

运用数学方法，范霍夫把化学研究进一步引向理论化。以波义耳为起点的近代化学，始终被人们看作实验科学。范霍夫重视实验，但他并不局限于此。在实验的基础上，他非常注意巧妙地运用数学方法去整理实验结果，并从数学方程式方面推导出一些理论上的新结论。例如，1896年出版的《化学动力学概论》，集中地反映了范霍夫应用数学方法进行化学研究的成果。经过理论研究，他建立了反应温度及其热效应与平衡常数在数学方面的依赖关系，表明了在一定的平衡系统中提高温度时，就会产生消耗热量的某种反应。范霍夫使用数学方法证实了关于平衡移动的勒夏特里原理。

1886年，范霍夫借助于数学方法首先推导出关于化学平衡的化学反应等温式：

$$(\Delta Z)_{T,P} = -RT\ln K + RT\ln Q_a$$

式中ΔZ为吉氏函数改变，Q_a是任意指定始、终态的活度商。利用这个公式就可以确定在指定的始态和终态下，该化学反应的方向。

1887年，范霍夫应用热力学方法，经数学推导，得出了与现代写为$\Delta T = \frac{RT_0^2}{\Delta H} \cdot X$相类似的经验公式，进一步补充发展了拉乌尔关于凝固点降低的研究成果。

---

① *Dictionary of Scietific Biography* VOLUME XI, p.577.

② 转引自〔保〕鲁·马诺洛夫：《名化学家小传》（下），科普出版社，1981年，224页。

同样，关于溶液渗透现象，1885年以后范霍夫进一步研究了普菲弗尔的渗透压定律。1877年德国植物学家普菲弗尔，曾用亚铁氰化铜的半透膜测定蔗糖及其它物质的水溶液的渗透压，得到了准确的数据。由此，他归纳出一个结论：在指定温度下，溶液的渗透压和它的浓度成正比。这里，范霍夫并没有去重复普菲弗尔的实验工作，而是通过一系列数学计算，得出了一个数学公式：$PV = iRT$并且将许多计算值拿来同实验值对比，取得了较好的效果。

综上所述，范霍夫高于当时大多数化学家的地方，就在于他不仅仅依靠实验手段，而且创造性地应用数学方法，把化学研究进一步引向理论化，有力地推动了化学的发展。

类比等逻辑方法的巧妙运用

这是范霍夫科学方法的又一特点。在1887年8月出版的《物理化学杂志》的创刊号上，范霍夫发表了一篇文章，题为《在溶液和气体的类比中看渗透压的作用》。文中总结了他对溶液渗透压的研究。在研究中他注意到，德国植物学家普菲弗尔测定溶液的渗透压时得出的结论：$P = \frac{KT}{V}$，即$PV = KT$，式中P是溶液的渗透压，V是它的体积，T是它的绝对温度，K是常数。这个式子与理想气体的状态方程很相似。由此，范霍夫就注意利用普菲弗尔的成果，进一步计算K值。结果，对蔗糖溶液来说，K恰好等于理想气体常数R，由于R是克分子气体的常数，其中就含有阿佛加德罗常数，说明溶液的渗透压也服从阿佛加德罗定律，这样就可以写作$PV = RT$。从这一类比中，范霍夫认识到，在稀溶液中，溶质所产生的渗透压P，和该溶质在同一绝对温度T下化为理想气体，并占有溶剂体积V时所形成的气压是相等的。可见溶液产生渗透压与气体产生气压的机理是类似的。范霍夫由此进一步探讨了关于电解质溶液对已确定的渗透压定律的偏差问题，并引用了系数i，使公式$PV = iRT$普遍适用于电解质溶液与非电解质溶液。从而大大发展了普菲弗尔关于渗透压的研究成果。类比方法的使用，说明范霍夫逻辑思维能力是比较高超的。

把模型方法运用于化学

在开创立体化学的过程中，范霍夫创造性地使用了模型方法。在1875年发表的《空间化学》一文中，范霍夫阐明了有机化合物的旋光性是由于其空间结构造成的。其中的"不对称碳原子"概念，就是他运用模型方法研究有机物分子的空间结构时提出的。他还使用模型方法研究了几何异构现象，用几何图式说明了顺丁烯二酸和反丁烯二酸的空间结构。

在有关化学平衡的研究中，他曾经假想出一个范霍夫平衡箱。借用这个理想化的模型，成功地解决了平衡常数K_p的推导。这是他在化学领域中应用模型方法的又一范例。

模型方法的广泛应用，标志着化学科学的进一步理论化。它使人们根据已掌握的实验事实材料建立起一个适当的模型，对一些比较复杂的化学现象和反应过程加以扼要的描述，从而认识其运动规律，形成新的理论。可以说，在化学领域中，范霍夫是模型方法的倡导者。

假说方法的运用

范霍夫研究化学还非常重视运用假说的方法。他早年在阿姆斯特丹大学作讲师时，从理论化学的教学与研究实践中，深深体会到"在学习自然科学中，观察和假想二者都是必要的。" 他曾专门研究过许多科学家的生平，指出这些科学家的一个共同特点，就是高度地发挥自己假想方面的天资。因此，范霍夫本人无论在立体化学还是物理化学的研究中，都十分注意在观察和实验的基础上，运用假想，提出创见。例如，当他发现有机化合物分子具有空间立体结构时，就立即写出论文（1875年）阐明自己的假说，提出了"不对称碳原子"的新概念。他的这一成就，受到了当时不少科学家的赞赏，有的认为，这是一个出色的假说，它将在有机化学方面引起变革。德国有机化学家威利森努斯教授，看了该论文后，写信给范霍夫说："您在理论方面的研究成果使我感到非常高兴。我在您的文章中，不仅看到了说明迄今尚未弄清楚的事实的极其机智的尝试，而且我也相信，这种尝试在我们这门科学中……将具有划时代的意义。"② 事实证明，范霍夫的这一假说，为尔后立体化学的建立和发展奠定了基础。

纵观范霍夫的科学历程，我们可以看到，他之所以能在化学上取得一系列杰出的成就，是与他具有科学的研究方法分不开的。这种方法与他的哲学思想有着密切的关系。十九世纪中叶，正当自然科学家中间普遍盛行一种轻视理论思维、厌恶哲学的经验主义思潮的时候，范霍夫却始终如一地酷爱哲学。他一方面长期投身于化学实验工作，同时又高度重视理论思维的指导作用。他在自然观方面，坚持了自发的唯物论和朴素的辩证法思想。尽管这种自然观还未上升到自觉的辩证唯物主义自然观的高度，但它却在某种程度上帮助范霍夫掌握了比较正确的自然科学方法论，从而使他在化学研究中取得了一系列成就。

乔世德　王淑萍

4.阿累尼乌斯的科学方法

斯万蒂·阿累尼乌斯，瑞典物理化学家，物理化学创始人之一。他对化学的主要贡献是他的电离理论与化学反应中活化能的概念，以及现代化学动力学中关于化学反应速度的学说。他的电离理论是原子分子学说、溶液理论及电化学理论长期发展的一个科学总结。不仅开创了电解质溶液理论的新纪元，而且推动了化学相邻学科的新发展。因此，阿累尼乌斯荣获了1905年诺贝尔化学奖。

阿累尼乌斯的电离理论所以能取得如此巨大的成就，主要决定于他的科学思想和科学方法。

敏锐的直觉和创造性思维

十九世纪六十年代，门捷列夫发现了周期律，原子分子学说和元素化合价学说不断

---

① *Dictionary of Scietific Biography* VOLUME XⅢ, p.576.

② 〔保〕鲁·马诺洛夫：《名化学家小传》（下），科普出版社，1981年，231页。

的发展。七十年代到八十年代，与化学密切相关的物理学与电化学也获得了卓越的成就。在这种情况下，科学家们对于溶液理论的研究也提到日程上来了。阿累尼乌斯同许多的敏感的科学家(如范霍夫、奥斯特瓦尔德等)一样，注意到：在化学、物理学的邻接点上，必然会有一种新的理论产生，如电化学，这种理论的出现，甚至发展成为一门新兴的边缘学科——物理化学。这种敏锐的直觉与大胆的设想激励着阿累尼乌斯的探索与追求。阿累尼乌斯的直觉的判断与分析的想象是建立在对已往科学理论研究的材料的综合分析和实验成果重新检验基础之上的。阿累尼乌斯系统地研究了克劳胥斯的《关于电解质中的电导》；柯尔劳希的《电解质的电导率》；希托夫的《关于电解中离子的迁移率》及楞次 (R.Lenz) 的《关于钾、钠、铵的盐溶液的电阻》、《关于酒精的电导率》及《关于钾、钠、铵与氢的化合物的稀溶液的电导》等理论著作①，同时，对他们提出的大量物理实验数据进行了分析，为了检验实验的确实性与可靠性，甚至重复作了某些实验以验证前人实验所提供资料的准确程度。然后，他才想象了电解质溶液中可能发生的电化学过程，得出了关于电解质自动离解成游离带电离子的概念。他说："我是在1883年5月17日的夜里产生这个概念的。那天夜里，在我仔细研究了全部问题之前，我不能入眠。"②阿累尼乌斯有极其丰富的想象力与假设判断能力。有许多问题在他没有从事实验研究之前，就能推断出这些问题的大概结论。1887年4月13日他给范霍夫的一封信中写道："我将研究一个早已引起我的兴趣的问题，但这个问题我还没有作过实验。……我猜想许多感光物质大概在曝晒情况下比平时具有更大的电导率。到目前为止只知道硒、碲和含硫化银的硫是这样的……我推测，比如空气、氯气、碘、氯化银以及一般的萤光物质都以或多或少明显的程度具有这种性质……我还推测，这些物质的分子都离解成光，并因此获得自己的传导性。很可能……这个问题与电解质离解的问题有十分密切的联系。"阿累尼乌斯在形成科学概念的过程中，正是由于不断提高并扩大了对电解质离解实质的直觉认识能力和创造性的思维能力，所以才使他能从根本上改变对稀溶液离解规律的理解，在不到几年的时间里，便找到了研究电离理论这一重大课题所应遵循的正确的途径。

在化学发展史中，最有意义的时期是科学家对科学的基本概念重新建立和加以修正的时期。在这个时期里，科学家不仅需要深邃的思想和直觉，还必须具有突破能力和创新精神，要善于把科学的预测、推论、假说升华为理论体系的高度。阿累尼乌斯在建立自己提出的"离子"概念的时候，首先注意到批判地继承前人在化学、物理学及电化学方面已经取得的科学成就，借鉴其合理部分来发展与巩固自己的思想观念及学说理论，成为自己新理论突破的起点。早在阿累尼乌斯之前，瑞典化学家贝采里乌斯就曾提出过，化合物具有一定的电荷的理论，并且提出了经典的电化二元论学说。俄国的格罗特古斯 (T.Гроттус) 最先提出电解时，水分子或电解质分子的荷电粒子互换的观念，并创立了电解质溶液电导的第一个理论。以后法拉第、希托夫、柯尔劳希、楞次等又极力主张电解质只有在电流的影响下，才能使溶液离解的思想和理论。阿累尼乌斯没有被

① 阿累尼乌斯当时并不知道他的前辈科学家们的所有理论思想与观点，只知道克劳胥斯、希托夫、柯尔劳希和楞次的著作，其它著作与科学观点都是以后才知道的。关于这个情况，阿累尼乌斯在他写的《化学理论》(1907年)中详述电离理论的由来时谈到了这一点。

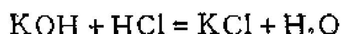
② Ю. И. Соловьев、Н. А. Фигуровский, *Сванте Аррениус* (1959)。

这些传统的、经典的溶液理论束缚住手脚，他投入到化工生产实践中去，投入到一切与溶液理论相关的实验研究中去。在他重点地研究了电导率，比较了电解与电离的现象之后，终于发现："酸（或一切电解质）溶于水中的全部分子只有一部分导电，而且随着溶液稀释度的增加，离解作用也加强。"接着，他在《电解质的导电性研究》论文中提出了"电解质进入溶液中，自动离解成带电离子"的科学概念作为电离理论的基础。奥斯特瓦尔德当时评价说："他立论的逻辑性是十分令人信服的。根据这一新的理论，甚至可以解释酸的催化作用。而且，可以认为，把一切酸结合起来的是酸溶液中的氢离子（H^+）。"[①] 阿累尼乌斯建立的电解质离解理论，正是用电化学过程与电解质水溶液的性质的概念来解释化学现象的。离子作为电离理论核心的概念正好说明了化学亲和力与电的关系：离子就是间断地带有正电（阳离子）或负电（阴离子）的分子碎片。阿累尼乌斯就是这样在分子科学与原子科学的接触点上取得了最大的成果。

唯物主义哲学思想与科学的物质观

阿累尼乌斯在溶液理论上的突破，是科学家在科学思想上的一种突破。阿伦尼乌斯所以能够打破传统保守的见解，创立电离理论，这首先要归功于他哲学思想的飞跃。阿累尼乌斯的思想基础就是他们唯物主义哲学思想与科学的物质观。他一直十分重视原子分子学说在化学科学发展中的作用。他在乌普萨拉大学读书的时候就认识到这一理论的重大意义，并开始研究电解质的电导，成为后来成功的开端。他还认为，既然物质是由分子组成的，那么溶解在溶液中的分子，必然还应该存在一种更新的物质，这种物质应该不同于普通的原子，这就是他发现"离子"和提出电离理论的基本哲学思想。

对于KOH与HCl的反应，旧的传统观念认为，反应的实质是：



$$KOH + HCl = KCl + H_2O$$

阿累尼乌斯的新思想认为，反应的实质是：



$$K^+ + OH^- + H^+ + Cl^- = K^+ + Cl^- + H_2O$$

阿累尼乌斯认为："离解出来的是氯离子（Cl^-）和钠离子（Na^+），不是氯气分子和金属钠原子。离子和原子在结构与性质上毫无共同之处。"[②] 阿累尼乌斯的离子概念，在当时是一个全新的概念；由于阿累尼乌斯以他科学的物质观揭示了电离理论的实质，所以赢得了电离理论最终被承认的胜利。

阿累尼乌斯是一个坚定的自然科学的唯物主义者，一辈子不信教，不接受洗礼，全身心地投入科学研究中去。他一生坚定地支持原子分子学说，元素周期律及元素化合价学说，并且利用教学与科学交流的机会，宣讲原子分子学说的科学思想。他相信科学，相信事实的唯物主义态度，使他有能力同当时的各种唯心主义科学思想倾向作斗争。他对奥斯特瓦尔德提出的"唯能论"持怀疑与批判的态度，他说："借助于贫血的热力学的机能是极难前进的。"[③] 他还批驳了克劳修斯的"热寂说"和"宇宙有限性"的错误理论，提出"宇宙将在时间上和空间上无限的演化"；克劳修斯的"热寂说"简直"对

---

① W.Ostwald, *S.Arrhenius*, p.77—78 (1909).

② S. Arrhenius, *Bemerkungen über einige gegen die Hypothese der elektrolytischen Dissociation erhobenen Einwände*, p.225—226 (1891).

③ S.Arrhenius, *Aus meiner Jugendzeit*.

我们来说是根本不可思议的。”①

阿累尼乌斯的许多宝贵的有关电离理论的哲学思想，都发表在当时的《哲学杂志》②这个学术刊物上。他在“评特劳贝克对电离作用假说的批判”及“化学与自然界的自然力”著作中，有力地批判了唯心主义思想，抨击了“原子本性不变”的谬论，提出“离子是原子特殊状态的表现”。阿累尼乌斯在溶液理论方面的成就，就是他们唯物主义世界观和哲学思想的胜利。

但是，阿累尼乌斯毕竟还不是一位彻底的唯物主义者。他曾在《哲学杂志》上发表了《电离作用反对水化作用》，拒绝接受门捷列夫提出的“水合理论”，进而全面否定“水合理论”，从而在很大程度上影响了电离理论的迅速发展。这说明，一个真正的科学家，树立辩证唯物主义思想，对推动科学研究及科学进步具有何等重大意义。

相关学科研究方法的综合运用

阿累尼乌斯在科学方法论方面一个突出的特点是，不仅善于把相关学科领域内的重大理论成果进行类比、分析、归纳、综合进行发展，而且还善于把相关学科的实验方法进行类比、分析，以获得崭新的实验成果。他通过物理实验、电化学实验、无机化学实验、分析化学的定性与定量的实验等综合性的实验手段和方法，获取来自各方面的实验结果。他曾用45种化合物作了电解质稀水溶液的电导率的实验；他同奥斯特瓦尔德进行了溶液电导及其内摩擦的实验；他同电导率测定大师柯尔劳希合作进行了气体导电的实验；他同能斯特进行了电化学的实验；他与范霍夫一起进行了对各种盐的蒸气的电导率、冰点降低的实验；他在1889年测出了水的离解热约等于13.9大卡，阿累尼乌斯确定该值等于最强的酸（HCl等等）与最强的碱（KOH等等）的中和热。这样的实验有时要经过几天，甚至几周、几月才能实现。他在这些多种学科的实验中反复切磋进行比较、分析、综合，直到所得结果都完全一致时，他才提出根据作为确立理论概念的基础。因此，他有可能在几门看起来互不相关的学科领域中，发现问题的关节点，找到新兴边缘学科的生长点，从而同奥斯特瓦尔德与范霍夫一起建立起物理化学这门新兴学科。阿累尼乌斯说：“我们研究的课题是属于一个很少被人研究的中间领域。这个领域在某些方面来说，是处于一些早已存在的学科的交界线上的。这个非常有利的情况使我们能够全面地来研究现象，使得这门学科能够迅速发展并将期望它继续进步。”③

阿累尼乌斯还善于运用数学方法来解决理论问题的实质。1887年他为了从量上证明电离理论的正确，曾同能斯特一起去格拉次（Gradze）向那里的数学物理学家玻尔兹曼（Boltzmann）学习了一个夏天。阿累尼乌斯是较早认识到数学方法对化学研究重要作用的科学家之一。他在电离理论中所引入的数学计算，在当时化学界，特别是瑞典化学界，所表现出来的那种物理学与数学知识落后的情况下，还不能被接受下来，所以使得电离理论迟迟不被承认。然而，阿累尼乌斯在那个时代，就已经认识到化学科学由定性向定量发展的可能性与必然性。他认为，物理化学家不懂得数学，就不能顺利地工作；

① S.Arrhenius, *Aus meiner Iugendzeit*.

② 《哲学杂志》（*Phil.Mag.*）是一本英文版的哲学刊物。这个刊物最早是由奥斯特瓦尔德在自己的科研中心创办的。

③ W.Palmaer, *S.Arrhenius*, Leipzig, p.55—57 (1967).

而且对化学家来说，物理学与数学的知识是绝对必需的。阿累尼乌斯的数学方法充实了他的电离学说。他认为，盐溶于水中就自发地大量离解成正、负离子。离子带电而原子不带电，它们是不同的物质。把同量的盐溶于不同量的水中，溶液愈稀，电离度愈高，分子电导μ也就愈大，到无限稀释时，分子全部变为离子，溶液电导μ_∞就有最大的值，于是提出$\alpha=\mu/\mu_\infty$，α当时称为“活度系数”（现称离解度）。他进一步用数学方法推导出：凡是不遵守范霍夫导出的凝固点下降公式和渗透压公式的溶液，都是能够导电的溶液（酸、碱、盐溶液）。这两个公式在右边都要乘上i（$i>1$）才符合实验结果。这是因为分子离解成离子，使溶液内溶质粒子数增加。如果一个分子离解为n个离子，则$i=1+(n-1)\alpha$。阿累尼乌斯还以别人的和自己实验的电导数据计算了α，所得的i值和凝固点降低实验所得的i值符合得很好，这是他的电离理论的一个重大成功。

阿累尼乌斯在对化学反应速度随温度变化的规律性给出物理意义解释时，指出：化学反应是依靠反应体系中那些数量极少，但能量很高的活化分子进行的。阿累尼乌斯根据活化分子的假说，利用范霍夫的公式得出：

$$\frac{d\ln k}{dT}=\frac{q}{RT^2}$$

积分后，得出下式：

$$k=Ae^{-\frac{q}{KT}}$$

其中k为反应速度常数，A是一个与温度无关的常数，叫频率因子，而q则为活化热（或活化能），这就是著名的反应速度指数定律。阿累尼乌斯通过数学与物理的方法，所揭示的该定律的物理意义，使化学动力学理论的发展迈过了一道具有决定意义的门槛①。阿累尼乌斯所给出的一系列公式，实际上就是把一种纯粹质上的理论假说，变成了可以用量来检验的科学原理。

阿累尼乌斯还善于从理论科学发展的高度，寻求科研的新鲜课题。他认为，“理论研究可以指出应当把今后的工作引到什么方向才能获得最大的成就。没有这种研究，科学就前进得慢，或者根本停滞不前。”②他还进一步指出：“理论是科学知识领域中最重要的推动力，……随着理论引进纯叙述性的科学，后者就渐渐发展成为精密科学，上世纪中化学的进展可以作为这一点的最好的证明。”③他认为：“理论化学的最新派别，乃是从作为精密科学的化学在近百年的发展中产生出来的一些学说中，得出的一个合乎逻辑的必然结果。”④由于阿累尼乌斯重视理论化学的研究，重视理论研究在科学上的重大作用，所以，他对电离理论的研究，他对溶液理论、反应速度以及活化理论的研究，都表现了最大的热心和勤奋。他曾不惜用13—15年这样漫长的时间，为捍卫电离理论，为发展电离理论而进行顽强不懈的论战。正是在这一思想方法的指导下，在上世纪化学科学研究方法的启迪下，他选择了“电离理论”作为科研的选题，并因此而获得巨大成功。

---

① 《化学发展简史》，科学出版社，1980年，229页。
② С.Аррениус, *Террии химии*, стр. 8 (1907).
③ 同②，стр. 2—3.
④ 同②，стр. 9.

阿累尼乌斯还善于运用物理化学方法揭示化学科学及化学变化的实质。当他研究电离理论的时候，他就认识到动电现象与热力学现象对于化学理论研究的作用，他在给范霍夫的一封信中写道：“我现在还不完全清楚，在我的动电现象概念和您的关于现象的热力学概念之间有哪些相互关系。但是，我毫不怀疑它们之间存在着最密切的相互关系。……两种理论都还处在最初的发展阶段，我殷切地希望，不久的将来，会在这两个领域之间架起不止一座而是几座桥梁。那时候，一旦联系上了，就能获得双重优点：巩固的热力学基础和精确而简便的电实验方法。”[1]他认为，借助物理化学的研究方法可以开辟广阔的科学途径。晚年，他在研究生物化学时，就是借助了物理化学方法弄清了在整个生物界的生活中起重要作用的化学过程的机制。他在《血清疗法中的物理化学应用》中写道：“我坚信，不借助物理化学中研究出的精确方法，生物化学不能发展成真正的科学。”[2]并指出，物理化学使得有可能在量上研究物质的性质、它们的浓度和温度对生理过程的作用与影响。他在免疫化学及抗毒素方面所获得的卓有成效的研究，都得益于物理化学方法。阿累尼乌斯不仅在化学相关学科之间强调运用物理化学方法，在其它学科，如宇宙物理学以及宇宙形成理论等科学研究中也借助物理化学方法取得了很大的成就。他在《宇宙中化学过程的物理化学定律》[3]及《物理与宇宙化学问题》[4]等著作中，解决了一个与阐明太阳不间断放射大量热的原因有关的重要问题。他还预言，太阳和恒星的主要能源来自元素原子的合成，特别是来自氢元素原子合成氦原子的过程中。他所发表的这些独到的见解，都是来自于物理化学方法的正确运用。阿累尼乌斯在上个世纪就看到物理化学方法在科学实践中的巨大作用和意义，这对今天科学的发展，特别是化学学科的发展将具有更重大的指导作用。

李　晓　东

5. 鲍林的研究方法

鲍林是现代著名的美国化学家，是杂化理论和共振论的创建人，也是化学结构理论的键参数方法的开创者。他长期从事晶体的研究，发表了三十种以上矿石的结构，乃至1950年和柯里共同提出了蛋白质螺旋构型。他由于对化学键的本性，特别是对复杂分子结构研究的贡献，而荣获1954年诺贝尔化学奖金。他对血清系统及抗体和抗原的蛋白质结构，对普通麻醉剂的分子基础，对异常酶和精神病的关系，对镰形细胞贫血原因，以及原子核结构等方面的工作都是人所称誉的。近年来，他主要从事古生物遗传分子机制的研究。一个人在如此广泛的领域取得如此众多（不少是开创性的）的成就，而且在五十余年的科学生涯中竟绵亘不断，这在现代科学史上确实不多。

鲍林为什么能取得这样的成功？这跟他所具有的研究方法特点是密切相关的。

实验研究和理论探讨相结合

鲍林自1918年始，就一直思索着物质的性质和它们的分子结构的关系问题。但他真

---

①E.Cohen, *J.H.Van't Hoff*, p.32 (1905).

②S.Arrhenius, *Die Anwendung der physikalischen Chemie auf die Serumtherapie*, p.35—38 (1904).

③、④*Lehrbuch der kosmischen Physik*, p.210、360 (1903).

正的科学研究生涯是在1922年作为研究生用X线测定辉钼矿的晶体结构开始的。实验的成功，使他认识到“关于世界的本质在通过精心计划和做过的实验之后会得到解答。”[1] 同时，他又比当时一般的化学研究生掌握了较多的数学和物理学知识；特别是他在1925—1927年间游学欧洲，直接从索麦非以及玻尔、薛定谔、布喇格等新物理学家那里，直接了解到物理学理论和实验的最新进展。他一方面是重视实验，强调经验知识；另一方面又深信化学结构问题可以通过应用现代物理学的理论来解决。力图把实验研究和理论探讨结合起来，是鲍林研究方法的基本特点；而这种结合，首先体现在他广泛采用的半经验方法之中。

鲍林在科学上的重大成功始于1927年对《离子的大小和离子晶体的结构》的研究。他根据薛定谔波动方程导出的原子模型，计算了多电子原子和离子的电子屏蔽常数，借此通过对离子间相互作用力和离子大小关系的讨论得出离子半径；然后将这种计算值和实验数据进行分析比较，经过种种校正而获得一套比较满意的离子半径表[2]。在这里，采用的就是半经验方法：既有根据物理学基本原理进行的演绎推导或论证，又有对实验资料的归纳，二者互相补充。

在鲍林的半经验方法中，作为归纳的前提往往是假设。鲍林借助屏蔽常数来讨论离子半径的模型就是假定性的，他认为：“提出一个简单的假设，从而通过与已有的化学实验资料作经验性的对比进行验证，然后再用来预测新的现象。”[3] 假说—归纳方法是化学家的传统方法，鲍林的研究方法特点是由于依靠了量子力学原理还同时更多地采用了演绎。演绎的作用不仅是作为提出假说的手段之一，而且渗透在概括实验资料的分析比较过程中，以及用于完成新理论的解释功能和预测功能。正如对共振论的考察所表明的，这种把归纳和假说、演绎紧密结合起来的方法，在概括现代复杂与精致的结构化学实验资料时是十分有效的。[4]

量子力学与化学经验相结合

鲍林在总结过去对离子半径的研究时曾指出：“应用量子力学可以近似地计算……但是，这种理论计算是十分复杂的，需要很大的工作量；因此，从化学方面考虑，最好有一套经验或半经验的离子半径数据……”[5]。

与许多量子化学的创始人一样，鲍林也曾被兼称为理论物理学家。但他作为价键理论的开创者之一，在研究方法上与德国的海特勒、伦敦等人不同，后者注重数学问题；而鲍林则强调“从化学方面考虑”，努力把量子力学的研究与化学实验，与化学本身既有的理论结合起来。鲍林从事大量的实验工作，并谙熟化学家的理论与传统，这不仅帮助他提炼新的理论，而且这种理论能较好地指导化学家的实践，迅速得到广泛的传播。在这里，鲍林的主要做法是：

（1）不断提出新的概念，利用它来概括实验资料和总结化学结构规律。而这些新

---

① L.Pauling, *Annual Reviw of Physical Chemistry*, 16, 1 (1965).

② L.Pauling, J.A.C.S., 49, 765 (1927).

③ L.鲍林：《化学键的本质》，上海科技出版社，1966年，Viii页。

④ 《江西大学学报（自然科学版）》1982年第8卷第6期，33页，熊权缙的文章。

⑤ 同③，501页。

概念的产生并非单纯依赖于量子力学的研究，同时还借助于化学中的经验知识。例如，1928年鲍林开始提出的杂化概念就是受到化学中关于四面体碳原子的观念的启发①。他用一个s轨道和三个p轨道"混合"形成四个sp^3杂化轨道，借以描述化合物中碳原子的价电子状态。在这里，鲍林不是简单地搬用量子力学对游离碳原子的描述，而是改变形式以适合化学的要求。又例如共振论中的共振概念，从思想渊源上说，早在量子力学出现之前就渐趋成形了；而鲍林根据价键理论线性变分方法的讨论把它置于新的理论基础上，并通过共振能来说明经典结构理论所不能说明的关于共轭分子的额外稳定性问题。

（2）发展简单的理论。这不仅是指"提出一个简单的假设"，理论形式本身简单；而且还指理论应用的简单方便。鲍林说："我的目的是用量子力学的概念来分析问题，而不是进行复杂的量子力学计算。"②他在谈到共振论时还强调，"比定量计算或许更重要的是应用简单的化学论证作预言的可能性。"③需要指出的是：第一，以杂化轨道为例，它作为价键理论定域描述的一个工作模型，依靠量子力学从电子层次上揭示了化合状态中原子的本质属性，从而"应用这个方法可以直接引导出最大数量的满意结果。"④所以，它的价值远远超过了经典的四面体碳原子模型。第二，一般说来这种简单的理论属于定性的理论。但正如对共振论的分析所表明的，在一定条件下，这种定性理论借助于对实验资料的分析比较，仍可在半定量的范围内得出许多正确的结论⑤。

（3）努力把量子力学的研究成果转译成化学家的习用语言。从理论上说，共振论是价键理论线性变分方法的直观外推，它采用经典的结构要素，并能套用部分的经典结构理论，这是它出现之后迅速被许多化学家接受并广泛传播的重要原因。

鲍林把量子力学与化学经验相结合的具体方式，是在当时具体的历史条件下出现的。但这种相结合的思想，对量子化学研究具有方法论的意义。

采用移植方法　开拓边缘学科

鲍林从事的化学结构研究本身就具有边缘学科的性质：在理论上是努力把现代物理学应用于化学领域；在实验上则采用现代物理学实验方法来观测化学结构。用x线测定晶体结构和用电子射线测定气态分子结构是鲍林的两大专长，概括这两方面的实验资料（键长、键角、键能、偶极矩等）是他建立和发展新的化学结构理论的主要经验基础。

鲍林说："到1935年，我认为我对化学键的本质基本上有了充分的认识。"⑥大约从这个时候起，他不断地把研究工作转向其它领域，其特点是把结构化学的理论和实验方法移植到生物学、医学以及核物理的研究中去。例如，1934年他由他所发展的三电子键理论和过渡金属杂化理论得到启发，从磁性角度探讨血红蛋白的结构⑦。1936—1940年间，鲍林对血清系统抗体和抗原的生物特异性的研究，是以这两种蛋白质分子具有互补结构的观念为基础的。所考虑的主要不是物质的普遍化学性质，而是它们在原子尺度上的

---

① L.Pauling, Proc.Nat.Acad.Sci.S.U., 14, 35(1928).
② L.Pauling自述，《现代化学译丛》第二辑，上海科技出版社，1980年，61页。
③ L.鲍林，《化学键的本质》，上海科技出版社，1966年，105页。
④《科学史译丛》1981年第1期，37页，L.鲍林的文章。
⑤《江西大学学报（自然科学版）》1982年，第8卷第6期，33页，熊权钢的文章。
⑥ 同④。
⑦ L. Pauling, *Nature* 161, 707 (1948) ; 248, 769 (1974) ; J.A.C.S., 62, 2643 (1940).

形状和大小的相互匹配。这样讨论问题的方式恰好是和鲍林极其丰富的关于化学结构的知识相适应的。1956年，鲍林提出的关于原子核结构的α粒子模型，实际上是利用化学中杂化轨道概念，把有关核结构的集团粒子模型和壳层模型综合起来，以便更好地解释一些原子核的能级结构。

分子生物学、分子医学等作为新兴边缘学科，本身就是非常富有生命力的。鲍林在把结构化学的理论和实验方法移植到这些新领域时，是努力以自己的专长来选择课题，开展研究。这样，他就可能形成一种优势，迅速取得一般人难以取得的成功。他和柯里等人提出蛋白质分子的螺旋构型，一方面是依据了酰氨基的平面性，特别是氢键理论的结构化学知识，另一方面是根据对蛋白质晶体的x线测定的长期研究。而这些都是他的擅长方面。

鲍林的科学研究极富有进取精神。他按照自己的专长不断地把新的理论原理和新的实验方法移植于另一领域，解决新的研究课题，努力开拓新的学科边缘地带。这是他五十多年来研究成果绵亘不断的重要原因。

直觉和模型方法

在鲍林的研究工作中，直觉的运用占有非常突出的地位。无论是鲍林本人还是别人对他的评述都常常提到直觉①。综合起来，大致有以下若干表现：

（1）是与数学计算不同的一种寻求答案的方式。

（2）一种好奇心，它引起鲍林对某个科学课题的注意，并直接领悟到有可能用经验的方式来解答它。

（3）和想象一样，“不能归结为仅仅采用通常的逻辑规则和过程”，它和某种“深邃的洞察力”有关。

（4）鲍林对一个晶体的结构的确定，分为两步：一是推测、二是证实。这种“推测”，或者是鲍林本人自称的“随机方法”（stochastic method，源自希腊语，意为“根据推测预言真理的艺术”）也在直觉之列。

（5）“借助于对化学事实的非凡记忆”，是“经过实践”养成的。

必须指出：在鲍林的研究工作中，直觉的运用既常常借助于类比方法，还和模型方法密切相关。他不仅创建了杂化轨道这类具有图像的思想模型，还发展了实物的分子模型方法。利用直观模型来解决一般分子乃至生命物质复杂的化学结构问题，则是鲍林研究方法的又一大特色。

直观模型具有图像，这就方便了人们直接地加以理解，并容易和人们的日常经验联系起来掌握和运用。人们的知识是从感性的直观开始的，日常经验熟悉的、反映宏观现象的感性语汇，往往是思维中最生动最活跃的部分；而且，由于直观模型把思想具体化了，在脑海中形成了能与宏观事物联系的形象。这样，它不仅能帮助人们迅速发现事物的相互联系和类比性质，还能激发想象力。人们赞誉鲍林的物理和化学的直觉以及敏锐的想象能力，除了依赖于他极其丰富的经验知识之外，还有赖于直观模型方法的运用。

鲍林曾明确表示：“我想把经典力学概念同量子力学概念联系起来，使之互相协

---

① L.Pauling, *Proc.Nat.Acad.Sci.V.S.*, 54(4), 989(1965).

调。"[①]这个思想方法是很高明的（但有一定限制！）；究其原因，也和直观模型方法有关。

从整体看待世界　从实践对待科学

鲍林在谈到自己对于科学研究在方法上与别人的不同时曾写道："我总是问：'既包含这些观察而又不是与它们矛盾的最简单、一般和合乎理性的世界图景是什么？'我认为，我的态度基本上可以说成是理论物理学家的态度。"——显然，他把物理学应用于化学领域，把物理学和化学应用于生物学与医学领域，正是要认识上述的世界图景。鲍林"不相信生命力学说"、"反对宗教的启示"，自称"有从整体来看世界的简单立场。"[②]作为一位自然科学家，物质世界的统一性对于他来说似乎是不言而喻的。

鲍林重视理论思维，并不完全同意实证主义的见解，认为"它妨碍我们谈论许多东西。"他强调自己"是纯粹从实践的方面对待科学；可以说，是实用地（但不希望按哲学的意义来解释这个词）对待科学。"[③]贯穿鲍林研究方法中的极其宝贵的思想正是这种"从实践的方面对待科学"的态度。

如前所述，鲍林的研究方法是在一定的历史条件下形成的，并且和他本人具体的知识结构特点有关，他对科学抽象的理解也不一定确切。但是，从他努力把实验研究与理论探讨相结合，把量子力学和化学经验相结合努力开拓边缘学科，从他的科学实践中反映出来的各种研究方法的相互联系和相互转化来看，表明他是沿着辩证法的道路前进，他在这些方面的宝贵经验值得我们借鉴。

熊　汉　铎

6. 中国化学家的科学方法

实践证明，正确的方法对科学研究和科学的发展，起着重要作用。事实上，科学家每走一步，都会遇到一般的方法和方法论问题。方法论就象希腊神话里讲的从迷宫中引出之线，它会把科学家从纷繁复杂的迷宫中引出，从而到达客观真理的光明之处。

中国化学家研究科学方法论的开端

近代早期的科学革命，除了当时欧洲的政治原因和生产发展的需要外，其产生主要有两个原因：第一，是一种新研究方法的兴起，即科学的方法；第二，是一种理智上的变化，即产生一种对世界的新看法[④]。在十五世纪和十六世纪，欧洲就有人在大学里讨论科学方法问题，而科学方法论的创始人，则是十六至十七世纪的英国政治家、哲学家培根和十七世纪的法国哲学家、科学家笛卡尔。培根是英国近代唯物主义的始祖，他首先提出了科学的方法论——"归纳法"[⑤]，阐明通过观察和实验，对客观事物进行归

① L.Pauling，自述，载《现代化学译丛》第二辑，1980年，61页。
② J.D.H.Donnay, *The American Metalogit*, 53, 521 (1968)。
③ 同①。
④ 斯蒂芬·F·梅森：《自然科学史》，上海人民出版社，1977年6月，113页。
⑤ F.W.Westaway著，徐韦曼译：《科学方法论》，上海商务印书馆，1935年，123页。

纳，从而发现真理，是科学研究的重要方法。著名数学家笛卡尔则创造性地发展了“演绎法”，主张用推理的方法来研究科学。

到了十九世纪，产生了以辩证唯物论为基础的马克思主义哲学。特别是恩格斯的《自然辩证法》和《反杜林论》等著作的发表，不仅对十九世纪中叶自然科学的重要成就作了辩证唯物主义的概括，而且批判了自然科学中形而上学和唯心主义的观念，促使科学方法论从自发的唯物主义倾向，逐渐沿着自觉的唯物主义方向发展和提高。

进入二十世纪，随着现代科学技术的迅速发展，科学方法论的研究和讨论，引起越来越多的人们的重视。我国老一辈化学家王星拱教授，便是最早在我国研究和传播科学方法论的学者之一。

王星拱，安徽怀宁人。早年留学英国，于伦敦理工大学获硕士学位。在中国早期留学生中，他思路敏捷、知识面广，阅读过不少有关自然科学、社会科学和哲学方面的书籍。早在二十世纪初，他任北京大学化学系教授时，就开始研究和讲授科学方法论。1920年，北京大学将他的讲稿汇编成《科学方法论》一书，作为“新潮丛书”之一出版，这可能是我国有关科学方法论的第一部专著。王星拱在该书的“引言”中，阐述了“科学”的含义，指出凡是确切的、明晰的、有系统的学术，都可以叫做科学。论述了科学是人类智慧的结晶，科学之于人类，不仅在物质方面有利于人类的利益；在思想方面，可以使人分辨是非、树立唯物史观。并强调方法论的重要性，认为方法越好，失望（就是由错误而生的）越少。

《科学方法论》一书，对归纳、演绎、观察、实验、假定、类比、推理、分类等方法论的基本问题，都作了介绍和阐述，并列举许多自然科学的例证，其中有不少是化学科学方面的例子。

继王星拱在我国倡导科学方法论之后，三十年代，天津工商学院的申自天也开始研究和讲授这一门课程，并于1939年在天津出版了一本供青年阅读的综合性通俗读物——《科学方法论》。该书“导言”中，对科学的认识、科学的分类和科学与哲学的关系等基本问题作了概括介绍。书中对数学、自然科学、生物学、精神科学等不同学科，分章节作了论述。在“论自然科学”一章中，深入浅出地介绍了观察、实验、归纳、演绎、假设等基本方法，还阐述了物质统一、化学定律以及物理与化学的关系等许多基本问题。该书对在我国宣传和普及科学方法论，起了一定作用。

良好的化学研究方法　卓越的化学研究成果

我国老一辈化学家，在二十年代至四十年代期间，自觉或不自觉的应用科学方法论做出了一些贡献，不仅为我国化学化工科学技术的建立和发展奠定了基础，而且也为我们树立了在化学科研与教学中运用良好的研究方法的表率。他们的有些成果已达到当时的世界先进水平，对国际学术界有一定影响。

著名化学家、中国制碱工业的先驱者侯德榜（1890—1974），在本世纪的二十年代，就开始致力于制碱研究。三十年代后期，由于日军侵占塘沽，永利化学工业公司在四川五通桥重建碱厂。侯德榜针对传统苏尔维制碱法食盐利用率低的缺点，根据中国井盐价格昂贵的国情，决定舍弃苏尔维法，研创制碱新法。经过精心设计和反复试验，新的联合制碱法于四十年代初获得成功。该法与苏尔维法相比，不仅大大提高了盐的利用

率、节省了设备，而且由同样母液可以得到碱与氮肥两种产品，又能连续生产，使产量大为提高。1941年3月15日，该法被正式命名为“侯氏碱法”①，1943年完成日产半吨的试验厂。从此为制碱工业开创了新路，侯德榜也在国内外赢得很高荣誉。

在开创“侯氏碱法”的过程中，侯德榜对试验要求非常严格，他不但设计好总体方案，而且对每项内容都提出具体的目的和要求。他的合作者们共进行了五百多次循环试验，分析了两千多个样品。侯德榜对每次试验的结果，都认真分析，注意从中发现问题和总结规律。他在新法获得成功后，曾谦虚地说：“科学领域的客观事实，迟早会被人们发现的。联合制碱，欧洲也在进行，不过我们多做了些工作，比较早些发现客观规律罢了”②。“侯氏碱法”于抗战期间、在条件艰苦的华西地区获得成功，充分反映了中国科学家的聪明才智，和为改变我国科学技术落后面貌而自强不息的奋斗精神。

著名生物化学家、我国生物化学和营养化学的主要创始人吴宪（1893—1959），治学严谨、见识精邃，毕生致力于生物化学和营养化学的研究，共发表学术论文160余篇，并著有《营养概论》（1929年）和《物理生物化学原理》（英文版，1934年）。他用自己的博士论文作基础写成的“血液系统分析法”，为临床诊断提供了重要手段，被各国医疗界广泛采用，并为现代临床化学奠定了基础。他因此在国际上被誉为血液分析的权威。三十年代初期，吴宪还对刚刚发展的性激素，进行了一些试探性的研究工作，开我国激素生物化学研究的先河。

假设或者设想，是研究工作者重要的思维方法之一，也是研究工作中十分重要的智力活动手段，吴宪在科学研究中，经常作出大胆而深远的设想。他曾说：“我们的研究工作，是为了将来能用人工法制造具有生命的活细胞。平时要在这方面常作思考”。③

我国有机化学的先行者庄长恭（1894—1962），在有机合成特别是甾体化合物的合成，以及对天然产物结构的研究方面，做出了许多贡献，在国际有机化学界享有盛誉④。三十年代，他对麦角甾醇结构的研究获得杰出成就后，便主要从事与甾体有关的化合物的合成，大大推动了多环化合物化学的发展。

新技术的出现，对科学研究起着重要作用。庄长恭很注意新的实验技术在科研工作中的应用。他最早在我国采用微量分析的新技术，对此后国内这方面研究工作的开展，产生了深远的影响。在实验工作中，他具有精湛的技巧、敏锐的观察和严谨的科学态度。例如他在决定麦角甾醇的结构时，从麦角甾烷的氧化物里，发现有难溶性的钠盐悬浮于乙醚层与水层之间，将其分离酸化，得到了关键的去甲异胆酸，但其数量极其微少（从7克麦角甾烷中只得到20毫克的去甲异胆酸，就当时的技术水平来说这是相当先进的）。然而，对麦角甾醇结构的推定，却是有决定意义的。当这项工作发表后，有一位在哥丁根同一实验室的化学家曾说他的运气好，庄长恭则回答说：科学研究不是靠运气的，必须要有坚强的毅力、严谨的态度和敏锐的观察，才能获得成功。

四十年代末期，庄长恭详细地阅读了《联共(布)党史》中“辩证唯物主义与历史唯物主义”一章内容，使他对马克思主义的思想方法，有了充分的认识。此后，并以此精神

① 李祉川、陈歆文：“‘侯氏碱法’的诞生和发展”，《化学通报》1982年第8期，29页。
② 李祉川：“纪念卓越的科学家侯德榜博士”，《纯碱工业》1979年第5期，7页。
③ 刘思职等：“我国生物化学的开拓者——吴宪教授”，《化学通报》1981年第4期，57页。
④ 田遇霖等：“我国有机化学的先驱——庄长恭教授”，《化学通报》1979年第4期，77页。

组织和领导了中国科学院上海有机化学研究所的科学研究工作，为社会主义建设做出了积极贡献。当时，郭沫若院长曾把他称为我国化学界的一面旗帜。

著名有机化学家黄鸣龙（1898—1979），以他改良的开西纳-武尔夫（Kishner-Wolff）还原法（简称黄鸣龙还原法）著称于世。在有机化合物的合成和结构测定上，需要将醛类或酮类的羰基还原为次甲基时，常常用到Kishner-Wolff反应，但是此法要用封管和金属钠，以及难于制备和价格昂贵的无水水合肼，而且还会引起一些副反应。黄鸣龙于1946年对此法进行了卓有成效的改进，在国际上被广泛采用，并写进各国有机化学教科书中①。后来，他经常拿这个例子向青年科技人员说明，做实验时一定要认真观察实验现象，并特别强调当反应过程中出现异常情况时，要尽可能将反应结果弄明白。他说他在做Kishne-Wolff还原反应时，出现了意外情况，但他并未弃之不顾，而是认真研究，继续把实验做完，结果得到了出乎意料的好产率。于是他仔细分析原因，又通过一系列改变条件的实验，终于达到了改良的目的。由此可见，黄鸣龙还原法的发现，虽属于偶然，但在他勤奋、严谨、敏锐的治学精神中，却孕育着成功的必然性。

1956年，黄鸣龙以“如何向科学进军”为题，向青年科学工作者讲述了自己的治学方法和治学经验：

（1）先探后进。做研究工作，必须先做试探性试验，即先用极小量或小规模的试验，观其结果如何，以避免浪费及祸患。

（2）坚持唯物。科学是积累起来的，科学研究不能割断历史，所用的研究方法，不能异想天开，而必须合乎科学上的发展规律。科学工作者，必须十足唯物，不可丝毫唯心。

（8）不怕麻烦。在研究工作中所观察到的变化和所得到的数据，非随时进行记录不可，万不可自信自己的记忆力强。

（4）不依赖别人。研究工作者，尤其是初做研究工作的人，绝不是靠旁人代劳，因为实验中的现象及操作情况，都是推论和判别成败原因的根据，如果失去观察机会，就会影响工作的效果和判断能力。

傅鹰（1902—1979）是我国著名的胶体化学家和表面化学家，他在胶体化学特别是表面化学的研究方面，作出了许多重要贡献。早在二十年代，他在留美期间做博士论文时，就广泛研究了硅胶自溶液中的吸附问题，对胶体和表面化学中著名的屈劳倍(Traube）规则，进行了重要的修正和完善，得出了在一定条件下，吸附量的次序与屈劳倍规则完全颠倒的罕见结果②。在此期间，他还开展了液体对固体的润湿热的研究，首次系统地测定了二元液体混合物对固体的润湿热，并进一步研究了利用润湿热测定固体粉末比表面的热化学方法，这在当时是一项开创性的工作。此外，他还与吴宪合作，研究了鸡蛋清蛋白溶液的表面张力，发现在等电点时，表面张力有最低点，并利用吉布斯公式计算出鸡蛋清蛋白分子的横截面积是250Å²，这是蛋白质界面化学的先驱工作之一。他早期的许多重要研究成果，多次被一些著名学者引用，在国际学术界很有声誉。

傅鹰在科学研究和教学工作中，十分重视历史经验和辩证思维。他强调科学的继承

① 周维善、徐榆文：“缅怀著名的有机化学家黄鸣龙教授”，《化学通报》1980年第1期，58页。
② 顾惕人、周乃扶：“胶体化学和表面化学家傅鹰教授”，《化学通报》1980年第7期，60页。

性，认为新的研究是建筑在旧的基础上，因而非常重视古今中外科学的借鉴。他曾说过："一门科学的历史，是那门科学中最宝贵的一部分。科学只能给我们知识，而历史却能给我们智慧。"①五十年代，傅鹰曾为《化学通报》写过一篇著名的文章"化学研究三部曲"②，围绕着如何对待科学研究和怎样进行科学研究，作了深刻的分析和鲜明的阐述。其中有不少内容和观点，充满了科学的辩证法和方法论，至今仍可从中得到许多启示和教益。

知名化学家曾昭抡（1899—1967），是我国最早在高等学校倡导化学研究的学者，一贯主张高等学校应科研与教学并重。他知识渊博、工作勤奋、毕生致力于我国的科学、教育和学术团体的事业。早在三十年代初期，他就对许多有机化合物、无机化合物的制备和分析，做了大量研究，发表了不少颇有价值的学术论文③，其中合成对-亚硝基苯酚这一重要成果，被载入《海氏有机化合物词典》，为国际化学界所采用。

著名物理化学家黄子卿（1900—1982），是我国物理化学界的元老，终生致力于物理化学的科研和教学工作。水的三相点是热力学研究中的重要数据，但长期没有公认的精确数值。早在二十年代，黄子卿留美期间，就以严谨的科学态度，精心设计了实验装置，经过反复测试，测得了当时最精确的水的三相点（0.0098℃）。这一出色的成果，被国际温标组织采纳，公认为国际上通用的标准数据④。黄子卿也由此而被选入美国编纂的《世界名人录》。

用科学的方法论指导化学科研与教学

建国以来，特别是近一、二十年来，我国化学工作者自觉学习辩证法的人逐渐增多。他们用科学的方法论指导科研、教学和其它工作，取得不少重大成果。人工合成胰岛素的成功便是其中之一。

在一百多年前，恩格斯就指出："生命是蛋白体的存在方式"⑤，"生命的起源必然是通过化学的途径实现的"⑥。1965年，我国化学（包括生物化学）工作者，在世界上第一次用人工方法合成了具有生物活力的蛋白质——结晶牛胰岛素，实现了人工合成蛋白质的创举。这一重大贡献，加深了人们对生命起源、生命本质及其运动规律的认识，发展和丰富了恩格斯的预见。

人工合成胰岛素的成功，使人类在认识生命、揭开生命奥秘的历程中，又迈进了一大步，它标志着人工合成蛋白质的时代已经开始。这一居于世界前列的重大科研成果的取得，不言而喻是具有多方面的因素，至少在看准方向，确定选题，组织协作，联合攻关；战略上藐视，战术上重视，不断剖析失败原因，总结经验教训等几个方面值得总结与发扬。

这项工作，经过一大批科技工作者近七年的共同努力，终于在1965年9月17日得到

---

① 傅鹰："黄子卿的'物理化学'"，《化学通报》1956年第4期，63页。
② 傅鹰："高等学校的化学研究——一个三部曲，"《化学通报》1955年第9期，513—520页。
③ 王治浩、邢润川："知名学者、化学家曾昭抡教授"，《化学通报》1980年第9期，54页。
④ 刘瑞麟、阮慎康："我国著名的物理化学家黄子卿教授"，《化学通报》1980年第11期，55页。
⑤ 恩格斯：《反杜林论》，人民出版社，1971年，78页。
⑥ 同⑤，70页。

成功。这一成果，获得国际学术界的承认和好评，于1982年荣获国家科委颁发的我国自然科学一等奖。尽管对该项工作的评价有过争议和不同看法，但在探索生命之谜的研究进程中，毕竟是一项开创性的成果，生动地说明了像蛋白质这样重要的生物大分子的生物功能，完全是由它的化学结构决定的，也说明了生命物质和非生命物质在本质上的一致性。

七十年代和八十年代，我国化学家学习和运用科学方法论，又相继做出了一些有意义的成果。例如，根据对立统一规律，归纳出有机化合物的“同系线性规律”，运用模型方法，提出了化学模拟生物固氮的原子簇结构活性中心模型；在辩证唯物主义思想指导下，提出了量子化学的有关计算方法和计算公式……。这些成果，为我国化学领域的某些分支学科开拓了新的研究方向与途径，在国内外赢得好评。

近年来，我国还有一批化学工作者和哲学工作者，开始从事诸如结构理论和量子化学研究中的方法论，科学研究中的分类法，以及把科学方法论研究与科学史研究结合起来等课题的研究和探讨，这对化学哲学和化学科学的发展，都起着积极的促进作用。

总之，科学方法论在我国化学家中间，已经和将会继续产生重大影响。我国化学工作者，在科研和教学等工作中，自觉以正确的哲学思想和科学方法论作指导的人数日益增多，今后若能蔚然成风，一定更有助于推动我国化学科学研究与教学工作的长足进展。

王 治 浩

五　现代化学的哲学问题

（一）现代化学发展的概况

1.辩证自然观与化学进化

物质世界进化链的层次结构

辩证自然观把世界看成是"在本质上某种从浑沌中产生出来的东西，即某种发展的东西，某种逐渐生成的东西"①。恩格斯又说："随着自然科学领域中每一个划时代的发现，唯物主义亦必须要改变自己的形式"②。这是十分精辟的论述。二十世纪自然科学的发展，为丰富发展辩证唯物主义创造了条件。根据大爆炸宇宙理论，恩格斯所说的某种"浑沌"，笔者认为可以理解为就是宇宙大爆炸。大约在200亿年前的爆炸初期，宇宙处于高温高密状态，只存在着中子、质子、电子、中微子等基本粒子。以后宇宙就沿着两条线并行发展。一条是宇观链，即天体演化和地质演变；另一条是微观、宏观链。我们把后者又分为物理进化、化学进化、生物进化和社会进化四个阶段，如图5.1

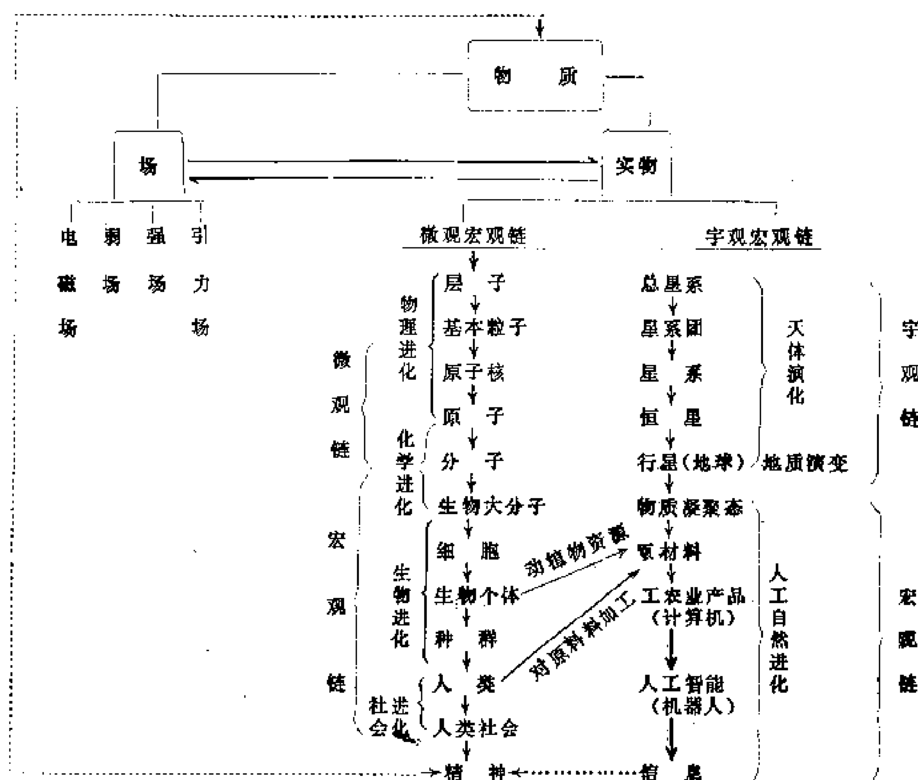


图5.1　物质世界进化链的层次结构图

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，164页。
② 《马克思恩格斯选集》第四卷，224页。

所示。

在图5.1中，物质首先分为实物与场。场有电磁场，强场，弱场和引力场。场与实物之间有相互作用。实物从简单的粒子到复杂的生物个体以至人类的发展过程叫进化。图5.1中层子（夸克）目前已知有若干种。比层子更基本的粒子，目前还不清楚，所以画的是虚箭头。从层子到基本粒子→原子核→原子这个发展过程，我们叫它物理进化。由原子→分子→生物大分子这一段可以叫做化学进化。生物大分子变成单细胞生物，再发展为植物、动物、高级动物，甚至发展到人类，这一段叫做生物进化。人类要产生精神的东西，要产生感觉、思维、意识形态等，人类社会还有进化，所以这一阶段叫社会进化。以上四种进化构成物质世界发展的微观宏观链。

另一方面，宇宙天体的演化和地质演变构成宇观进化链。宇观现象与宏观现象的差别在于前者不能用人力去改变，而后者是可以用人力来改变的。对于宇观现象只能进行观察而不能进行实验，而宏观现象是可以进行实验的。当然宇观与宏观之间也没有可以截然划分的界限。以上两条进化链之间有紧密的相互联系，例如同类分子或原子凝聚在一起就产生物质的聚集态（等离子态，气、液、固态，超固态等）。一方面地球和各种天体是由物质的聚集态组成的。另一方面，人们对物质的聚集态进行加工，可以制成原材料以及千千万万种工农业产品。工业产品中有计算机，机器人，还有所谓"专家系统"，例如用计算机可以设计纺织品的图案，可以为人们提供最佳的有机合成的路线，还可以看病，有相当于高级医生的作用。所以计算机、机器人已能代替一部分人类劳动，甚至辅助人类的一部分脑力劳动。这一条进化链，我们叫它为人工自然进化链。它是指由人类创造或加工的物质产品的进化。与"人工自然"相对应的就是"原生自然"，即人类出现以前宇宙中所存在的一切。从图中还可看出，总的来说，是物质产生精神，而精神对物质则有反馈作用。

化学进化的四个阶段

化学进化可以分为四个阶段，兹分述如下：

（1）化学元素的合成阶段

最简单的化学元素H可以俘获一个或二个中子，生成它的同位素D或T。D和T反应可以聚变生成He，He还可以进一步聚变生成C、O、N…等元素。在宇观条件下，还可以进一步合成近百种元素。用光学望远镜可以观察和分析各种天体中的化学元素，发现它们和地球上的化学元素完全一样。例如元素氦（He）就是在太阳光谱中最先找到它的谱线，然后在地球上发现氦气。这说明物质世界是统一的，它们有同一个起源。自然界存在的所有化学元素，已排成著名的元素周期表。人们还根据周期律的预见人工合成了第43号锝，87号钫以及从93号到109号（尚缺108号）等元素。新的化学元素还将进一步合成出来，但它们的寿命越来越短。

（2）星际小分子的合成阶段

近十余年来，由于射电望远镜的发展，人们在宇宙太空中观察到五十多个星际分子的转动光谱，与地球上相同分子的转动光谱完全一致。星际分子的发现，说明在宇宙发展的过程中，由C、H、O、N……等化学元素可以化合成各种小分子，其中特别重要的是甲烷（CH_4），氢气（H_2），水（H_2O）和氨（NH_3）等分子。这是自然界中化学

进化的第二个阶段。

（3）生物小分子合成阶段

在地球或其它天体形成的早期阶段，大气中氢气很多，氧气很少，还有大量的甲烷、水和氨等。科学上把这一阶段的大气叫做还原性大气。在还原性的环境下，由氢、甲烷、水、氨等小分子可以合成氨基酸、乌嘧啶、嘌呤等生物小分子。我们在太空中掉落的陨石中发现了这些生物小分子，就是一个很好的证明。1953年有个23岁的大学生米勒（Miller）做了一个有名的实验。他把还原性大气的主要成分氢、甲烷、水和氨四种气体封闭在一个石英管中，通过真空放电，结果发现管内生成了甘氨酸、丙氨酸、谷氨酸、天门冬氨酸等。这一试验模拟了由星际小分子生成氨基酸的自然过程，为自然界中化学进化的第三阶段提供了有说服力的证据。

（4）生物大分子的合成阶段

有了氨基酸、磷酸、戊醣、四种生物碱等与生物有关的小分子，就能组成生命的基础物质——蛋白质和脱氧核醣核酸（DNA）。

1953年，林维格诺德成功地合成了由8个氨基酸构成的催产素（一种最小的蛋白质分子）；1960年伍德沃德合成了叶绿素分子；1965年我国合成了牛胰岛素蛋白质分子；1969年国外合成了链上有124个氨基酸的核糖核酸酶。目前现代科学已能够合成人们所需要的许多蛋白质。

1953年沃森和克里克提出了脱氧核糖核酸（DNA）的双螺旋结构。DNA分子利用周围物质能够复制自己，由一个DNA分子变成两个完全相同的DNA分子。1956年，恩伯格用一种酶催化合成了DNA分子。现在认为，只含核酸分子的类病毒是化学进化最后阶段的产物和生物进化的开始。

以上是说在实验室的条件下合成了能够自我复制的活分子，完成了化学进化的第四个阶段，即死分子到活分子的飞跃。现在要问：在宇宙演化中，无生命到有生命的飞跃是在什么样的环境中完成的？关于这一问题，目前尚无定论。比较有说服力的假设是，水陆交界的含有金属离子的泥土可能是生物大分子合成的无机模板。

生物进化的序列

根据病毒学和生命起源的最新进展，有人排出生物进化的序列①、②：

类病毒（RNA分子）⟶病毒（核蛋白大分子）⟶甲烷产生菌（原始细胞）⟶蓝绿藻与细菌（原核细胞）⟶真菌（真核单细胞）⟶较高等生物（真核多细胞）。

关于生物进化的问题，叶峻的论文“关于近现代生物学与辩证生命观的诞生和发展”已有详尽阐述③。

生物进化的化学基础

在生物的进化链中，DNA分子愈来愈复杂。例如噬菌体的DNA只含有3000到

① 李泉根：“病毒分类学的进展”，《生物科学动态》1981年第1期，39—40页。
② 刘艾生：“类病毒”，《自然杂志》1979年第7期，421—424页。
③ 叶峻：“关于近现代生物学与辩证生命观的诞生和发展”，全国辩证自然观学术讨论会论文，1983年。

5000个核苷酸，细菌的DNA就含有几百万个核苷酸，把它拉直后长约一毫米，而人类的DNA含有一百多亿个核苷酸，把它拉直后长可达二米。因此对应于宏观的生物统一分类法，或许可以建立在分子基础上的基因分类系统，从而为人工创造新的生物品种开辟道路。

化 学 的 定 义

（1）定义一：化学是分子的科学。

在十九世纪，化学被认为是原子的科学，物理是分子的科学。到了二十世纪，似乎可以倒过来，化学是分子的科学，而原子的科学却成为物理学的某些分支——原子物理学、核物理学、基本粒子物理学等等。从物质世界进化链的层次结构图可以看出，在微观链中，化学主要研究从原子到分子到生物大分子的层次，因此化学的定义是否可以概括为："化学是研究物质分子及其聚集态的组成、结构、性质和变化规律的科学，简言之，化学就是分子的科学或分子学。"

在十九世纪，伟大的俄国化学家门捷列夫总结出化学元素的周期律，对化学元素进行了科学的分类，预见了未发现的新元素。到现在已知的元素或原子的种类共有109种，未发现的新元素为数已不会很多，而且由于它们的寿命愈来愈短，对化学的意义已不那么重要了。现在化学的战略重点已经转移到合成日益增多的新分子和新材料，来为增加人类的福利服务。现在已知的分子共有七百多万种，在八十年代，人类平均每天要合成1000种新分子。因此数以百万计的分子分类法已经提到人们研究的议事日程上来。1983年7月，在长春召开的全国化学化工辩证法讨论会上，笔者提出了分子的四维分类法，即用四个数字（n、x、c、π）来划分数以百万计的分子的结构类型以及关于原子价的新概念①-⑤。这些新的想法远非成熟定型，只是提出来作为抛砖引玉，希望引起同志们从自然辩证法的哲学角度，对分子的科学分类和化学的发展提出更为完整的见解和理论。

（2）定义二

另一种更为广泛的化学定义是："化学是研究从基本粒子到生物大分子的各层次的粒子的质变的科学"。因此化学可以分为：

①分子化学，即研究分子质变的科学，亦即传统的化学。

②原子化学，即研究原子和原子核质变的化学，亦即放射化学和核化学。

③基本粒子化学，奇异原子化学等。

以上是很不成熟的一些想法，请同志们批评指正。

徐 光 宪

---

① 徐光宪："分类方法在化学发展中的作用"，全国化学化工辩证法学术讨论会论文，1983年。

② 徐光宪："原子价概念的发展"，同上。

③ 徐光宪，*Structural Rules and (nxcπ) Formalism of Cluster Compounds and Related Molecules*, China—Japan—U.S.A. Symposium on Organometallic and Inorganic Chemistry, June 14—18 (1982).

④ 徐光宪："原子簇与有关分子的结构规则Ⅰ.(nxcπ)格式"，《高等学校化学学报》1982年，专刊，114—123页。

⑤ 徐光宪："原子簇与有关分子的结构规则Ⅱ.共价的新定义"，《分子科学与化学研究》1983年第2期，1—10页；*J. Molecular Science*, 1 (1), 1—14 (1983).

2.现代化学的特点

十九世纪末，X射线、放射性和电子等三大新发现，猛烈冲击着道尔顿原子论关于原子不可再分的观念，打开了原子和原子核内部结构的大门，开始揭露微观世界的奥秘，把整个自然科学推进到更深一级的物质层次的研究。化学正是在这场科学革命的洪流当中，由于三大新发现以及二十世纪初原子结构的确证而进入到现代化学的发展时期。

现代化学的发展至今已有八十多年历史。在理论、方法、实验技术和应用等方面，均较近代化学有了深刻变化，出现了显著的新特点。研究这些特点，对于加深现代化学本质的认识，把握化学发展的趋势，具有重要的理论和现实的意义。

综观现代化学，可有以下五个显著特点：

实验设备的仪器化和计算机化

化学本来就是实验科学。化学实验是化学科学赖以建立和发展的直接基础。

化学实验水平的提高，主要取决于实验技术的不断进步。化学实验技术主要包括实验设备、实验方法和实验技巧三个方面。根据一定的目的，在一定的理论知识指导下，具体运用实验技术来变革物质，这就是化学实验。从总体来看，化学实验技术的进步，不仅以社会的科学技术发展水平为转移，而且大多更以社会生产的需要为动力。

远在化学还没有成为一门独立科学之前，由于化学工艺知识和社会生产实践的需要，分析检验的课题却早已提出，化学实验的实践活动也已开始。

从近代化学诞生发展到十九世纪它的繁荣时期，化学实验技术水平已有相当的提高。在实验设备方面形成了一整套的化学常规仪器（包括各种玻璃仪器在内），至今仍有沿用。大化学家每以娴熟的技巧，利用和改进已有的实验仪器和方法而提高实验的精确度。当时最有声望的贝采里乌斯精确地分析测定了原子量就是明显的一例。

当化学进入到现代化学发展时期，上述情况发生了根本性变化。不仅传统的实验技术由于科学技术的进步得到进一步改善，还出现了现代仪器化。如在微量分析和痕量杂质分析方面，出现了原子吸收光谱、极谱分析、库伦分析以及萃取、离子交换分离、色谱、电泳层析等新的分析和分离方法。对于化学元素或组分的分析测定、微观分子结构、晶体结构、表面化学结构等分析测试技术也有极大进展。如X射线荧光光谱、光电子能谱、扫描电镜、电子探针、穆斯堡尔谱、拉曼激光光谱、外延X射线吸收精细结构谱（EXAFS）、分子束、四圆衍射仪、低能电子衍射、中子衍射、皮秒激光光谱等等正在发展起来，其它如红外光谱、核磁共振、顺磁共振、质谱等已被广泛使用。如果说1945年以前的化学实验技术仍然同上一世纪没有多大差别的话，现在则大不相同，向着灵敏、精确、快速方面发展，能够更精确地进行定量测定，达到了微（10^{-6}）、纳（10^{-9}）、甚至皮（10^{-12}）数量级，促使化学科学更加精密化。

随着计算机科学和技术的迅速发展，近十几年来计算机在化学中得到卓有成效的应用，它正逐步变成化学仪器的重要部件，已经出现了各种仪器的联机使用和自动化，不仅用于电分析化学、谱学、微观反应动力学、平衡常数的测定、分析方法的理论研究和分析仪器的控制、数据的存贮与处理以及文献检索等，还能使经典（湿法）化学操作达到自动控制。并且出现了计算机辅助的化学结构自动解析和计算机辅助有机合成反应路

线最优设计等。

化学实验设备的仪器化，也促使实验方法和实验技巧相应地发展，从而使化学实验技术获得巨大进步。不仅迅速改变着化学的描述性、经验性和半经验性的状况，而且能使现代化学较快地赶上新的世界技术革命的步伐，并在其中起到应起的巨大推动作用。

从宏观层次深入到微观层次

就其本来意义，化学研究的对象主要是分子，可谓是微观的。但是在发现电子和揭开原子结构奥秘以前，化学还没有真正深入到微观层次。

可是，当发现了电子及其后的一系列发现，却使情况发生了根本变化。原子结构的研究有了突破，1911—1913年的卢瑟福、玻尔的原子模型，加深了对原子结构的认识；1916年柯塞尔和路易斯分别提出了原子价的电子理论，对原子结合为分子的化学键的本质在于电子的共享或得失，有了初步认识。至此，化学已经进人微观的研究。

但是，化学从进人微观研究到建立现代化学的微观结构的理论基础，还需经历一段时间。其根本原因在于必须先搞清楚电子这类实物微粒的特性与运动规律。

1926年，薛定谔根据德布罗意关于电子等实物微粒具有波粒二象性的假设，建立了微粒运动的波动方程——量子力学。量子力学阐明了与牛顿力学不同的微观粒子运动的基本规律，并成功地应用于氢原子和类氢离子结构的研究，由此才真正地建立了原子结构学说，并为奠定现代化学微观结构理论基础开辟了道路。

1927年，海特勒和伦敦引用量子力学原理于分子结构的研究，创立了量子化学，开始用来研究最简单的氢分子，并建立起崭新的化学键概念，对分子内部的电子运动的规律有了科学理解，这才使化学真正深入到微观领域。后来又经过斯莱特和鲍林等人的工作，于三十年代初发展成为化学键的价键理论。

由于马利肯、洪特和伦纳德-琼斯等人的工作，分子轨道理论于1932年前后建立。1929年贝特和范弗雷克根据十九世纪末维尔纳（Werner）的络合物配位理论，把中心原子和配位体的相互作用看作纯粹的静电作用，提出晶体场理论。1952年，欧格耳（Orgel）把晶体场理论和分子轨道理论结合起来，提出了配位场理论。

价键理论、分子轨道理论和配位场理论是现代化学键理论的三个基本理论。它表明现代化学已经从原子结构、分子结构及其结构与性能关系的研究上，建立了以现代化学键理论为基础的微观结构理论体系。可以说，化学已经结束了以描述性为主的阶段，将归纳和演绎在更高基础上统一起来，发展到推理阶段，建立起严密的微观结构理论体系。

这是现代化学最显著的特点，它建立在现代实验技术基础之上。现代化学的其它特点都与此有着内在关联，并与之相互渗透和促进，达到辩证的统一，促使它日新月异地发展。

从定性向定量化发展

马克思曾经说过，一种科学只有在成功地运用数学时，才算达到了真正完善的地步。

我们考察一下化学的发展，将会看到化学这门学科有它自身不同寻常的发展道路，

直到十八世纪后半期至十九世纪初期才踏上科学发展的道路，到了二十世纪才显著地提高了定量化的科学水平。

化学不象物理学那样，从创建开始就以微积分来表述其经典力学运动规律，经电磁理论到量子力学一直是以数学来表述，都是非常定量化的。化学则与之迥异。化学开始研究的是物质的组成、性质及其变化规律，就它的组成来讲要作一些分析，总是以定性为主进行描述，如某化合物包括什么元素，其间比例如何。这里虽然也有定量的含义在内，但就其性质来讲，有的也不是定量化的。另外，化学实验受到固有仪器的限制，特别是由于实验技巧这种经验性的作用极大，因之它用到的数学极少，仅仅达到初等数学的水平。所以，十九世纪的化学，以宏观性质研究为特征而建立的理论体系，基本上是以定性的描述为主的理论体系。

化学从定性到定量的发展，是和它与物理学的结合关系十分密切的。十九世纪创立的物理化学，即已表示出化学开始由定性向定量发展。而化学真正向定量发展，更几乎与化学从宏观到微观的过程同步进行。例如，热力学第一、第二定律与化学结合而形成化学热力学；分子运动方程、麦克斯韦运动方程与化学结合、与化学反应结合，就产生了反应动力学的碰撞理论等等，特别是量子力学与化学结合产生了量子化学。这些都反映了化学从定性到定量的发展过程。

现代化学的定量水平的不断提高，又与数学在化学中的直接应用分不开。现代化学特别是近二、三十年的发展，不但微积分、微分方程总是必不可少的，并且数学物理方法、线性代数、群论、图论、矢量分析、不可约张量法、拓扑学等高深的数学也已成为必需的了。现在，对于许多结构信息和物理化学性能的各种参量，都可以进行数学处理和计算。

数学在化学中的应用，突出的表现之一是在量子化学的发展上。由于借助电子计算机技术，使得繁难的量子化学计算得到很大改善，建立了一些多电子多中心体系的计算方法，特别是自洽场从头计算方法发展较快，已成为量子化学计算方法中的主流。同时，为了更好地处理量子化学中的多体问题，又发展了密度矩阵理论、传播子理论、多级微扰理论以及群论和图论的应用。这些原理和方法的新发展，大大提高了用量子化学处理化学问题的能力，因而量子化学的应用研究蓬勃发展起来。

值得提出的是，现代化学定量化水平的提高，又与精密的实验测试技术的发展分不开。高精确度、高灵敏度的实验定量测定与理论的数学处理相互促进，大大提高了化学科学的定量化水平。

从静态研究到动态研究

化学从宏观深入到微观、从定性到定量的发展过程，表明人们对物质静态结构的认识已由原子、分子深入到原子、分子内部结构及其各种量子状态。现在单晶结构测定工作已成为一种常规方法，为结构与性能的研究提供了更为丰富可靠的定量的结构数据。对四十多种蛋白质的晶体结构已能深入地测定了。七十年代发展起来的精密结晶学，可以精密地实验测定分子中的电子云分布和化学成键的状况。这些说明了对物质静态结构业已达到精细认识的程度。

众所周知，化学不仅要掌握化学粒子的结构和性能的关系，更要研究它的变化规

律，因此，化学反应始终是化学家重视的课题。

一个分子或分子化合物处于静态，那只不过是相对的，因其内部仍在运动。所谓静态，平衡态只是表示它的统计力学性质不再随时间变化而已。化学反应的始态和终态是静态的，其中间有个变化过程。而十九世纪的化学。着重研究比较容易研究的静态，从静态去研究动态的性质，利用热力学第二定律就可以判断变化的方向，对化学反应最多达到随浓度、温度而变化的总反应速率的宏观认识。但是我们知道，从静态研究动态总有一定局限性，要真正研究化学反应过程，就应从变化中研究变化。这种从静态到动态的研究，只有化学发展到现代水平才能达到。

现代化学不仅对反应历程从静态方面对分子结构变化的始态和终态有了深入理解，更由终态推测其微观反应历程。如1965年伍德沃德和霍夫曼提出著名的分子轨道对称守恒原理，将分子轨道理论从分子静态结构和性质的研究推广于化学反应历程的动态研究，预言和解释了化学反应历程。应用能量超曲面的量子化学计算于化学反应的热力学和动力学过程，也已能进行位能面、分子构像变化的计算。

更由于分子束和激光技术的应用，化学动力学已经形成了一个新的分支学科——微观动力学（即微观反应动力学），从微观层次出发研究反应的机理，已经深入到态-态反应的研究，加深了对精细动态过程的认识。它涉及到分子内部运动、分子间碰撞和相互作用，即考察分子在运动变化过程中相继出现的不稳定的“动态”结构及其进一步发生转化的微观步骤。如分子如何获得能量而激发，激发态如何在分子间重新分配能量，分子之间能量的传递，激发态中电荷转移的条件和机理，以及化学键的断裂与重接的规律。新兴的激光化学就是在微观动力学和激光光谱学结合的基础上发展起来的，近一、二十年发展非常迅速，这表明动态研究已有极大发展。

不仅如此，就连过去一直不能令人满意的液态理论，由于相变重正群理论和对临界点附近热力学函数奇特性的定量研究，建立了被称为换算的具有齐次形式的新状态方程，改进了经典的表述式。同时应用计算机模拟技术，使它达到了精确地求得非常接近于实验测得的性质和计算分子体系的运动性质。

从单一学科发展到综合学科和边缘学科

在十九世纪，化学已经形成了包括无机化学、分析化学、有机化学和物理化学四个分支在内的学科，但是，四个分支学科之间的联系却很少，几乎是各自独立地发展着。虽然那时已经建立起以元素周期律为基础的理论体系，但其与四个分支学科的关系也不都是很紧密的，有的甚至很松散。并且就化学与其它学科的关系来说，除物理化学外，基本上少有联系。

二十世纪现代化学的发展则大不一样。它既是沿着化学中各分支学科之间的相互渗透而且不断分化出许多新的分支学科的方向发展（至今已达到数十个分支学科）同时，也是化学各分支学科之间相互促进、影响、交接而逐步进行综合的过程。这种综合不仅体现在传统的无机化学与有机化学之间的综合，如络合物化学和金属有机化学都从无机金属原子和有机基团之间的配位结合为基本特征。由此可见，在这两个学科中，已经完全消除了无机物和有机物之间的界限。此外，这种综合还体现在，由于现代化学键理论，这种现代化学的理论基础已经形成，并且向各个分支渗透，使得整个化学学科向

着建立在统一理论基础之上的多层次立体网络结构的统一体系的综合学科发展。

化学学科本身的分化与综合是辩证统一的。化学学科的不断分化而出现新的分支学科，并不意味着脱离综合而单独进行，它的分化其实正是综合化的一种表现形式。新的分支学科不断出现，正在日益消除分支学科之间的传统界限，使各个分支学科更加紧密地联系而统一起来。正是由于这种高度分化和高度综合的深刻一致性，才导致现代化学向形成新的统一体系、向整体化的综合学科发展。

现代化学早已突破了化学已有的传统的研究范围，更与另外的基础学科以及其它学科交互作用，结合成许多边缘学科，这些边缘学科往往成为化学发展的前沿。如化学与数学结合产生了计算化学；化学与物理学结合产生了化学物理；化学与生物学结合产生了生物化学。其中特别值得提出的是量子生物化学、神经生物化学、细胞化学、组织化学、分子遗传学、化学胚胎学以及化学仿生学等边缘学科，都展现出蓬勃发展的趋向。

现代化学并与其它学科相互渗透，结合成更多的边缘学科，这更是多种多样，且有继续增加的趋势。如化学与宇宙学结合产生了宇宙化学，正在成功地探索着化学元素的起源和恒星演化的机制；化学与地质学的结合产生了地球化学；化学与海洋学结合产生了海洋化学；化学与药物学结合产生了药物化学；化学与食品研究结合产生了食品化学，等等，不一而足。

现代化学之所以有如此强大的渗透力，能与许多许多学科结合而形成边缘学科，这完全在于化学的本性、它的研究对象的本质特征决定的。不管物质形态如何纷繁万状，只要关系到它的结构和特性及其自身的变化，化学就必然能够涉足其中。

现代化学具有上述特点，正好反映出现代科学的整体化发展的趋势。化学与其姊妹学科物理学一样，在现代科学整体化的发展中，都扮演着主要角色，都能起到主要的基础的推动作用。

以上论述的现代化学的显著特点，都是其本质特征的通过各种关系或侧面的表现形式。这些特点反映出现代化学的本质特征是，化学已经超越出描述性的定性的静态的宏观性质的经验科学的范围，正向着微观的定量的动态的理论科学过渡。现代化学将是实验科学和理论科学的高度的辩证统一。这表明了化学科学已经由“必然王国”向着“自由王国”飞跃式的过渡。我们从现实社会生活中，不是已经敏感到这种情景了吗？诸如纯净材料、复合材料的日益增多，更向着人们需要的具有反应定向性、选择性的“分子设计”前进，新的化学能源的研究与开发，以及化学向生命科学的大进军等等就是明证。化学绚丽多姿的发展前景，更是光彩夺目，诱人向往。

深入理解现代化学的特点，对于化学各个专业的研究以及现代化学教育的改革和提高，都具有现实意义。

王 勉 之

（二）化学前沿的若干哲学问题

1.量子化学哲学问题初探

从化学作为一门科学出现的时候起，人们就力图用物理学来解释、探讨化学规律。

但在量子力学诞生之前，物理学在化学中的应用还比较有限，它最辉煌的成就是化学热力学。而化学热力学只能唯象地对化学系统有关能量转化方面的宏观行为作出判断，各种热力学常数以及其它化学知识的获得仍然要依靠化学实验；对于化学理论的基本观念——化学键的本性，物理学还不能提出满意的说明，亲和力则成了种种化学解释的遁词；而化学亲和力以及其它为化学家所接受的观念（例如路易斯的电子理论），却往往是当时的物理学家所难以理解的。在化学和物理学之间仍然有着一条深深的鸿沟。

量子力学以及量子化学的出现使上述形势发生了重大变化。它证明了所有的化学相互作用实质上都是电磁相互作用，并为电子层次上揭示化学现象的本质规律提供了广泛的可能性。这样，化学与物理学的关系问题就以新的形式和内容出现了，并引起了激烈的争论。早在1929年，量子力学创始人之一，英国的狄拉克就宣称：“量子力学的一般原理已经完备了……大部分物理学和全部化学的数学理论所必需的基础物理规律已经完全掌握了。”① 量子力学的另一位创始人，德国的W.海森伯在1958年进一步认为量子理论使物理学和化学“已经完全融合了”，化学成了物理学概念系统的组成部分，或者仅仅是物理学的应用学科②。1967年，量子化学的创始人之一，美国的马利肯断言：“计算化学的时代即将到来。那时，若不是成千也是上万的化学家，为了化学信息中日益增加的许多细小侧面，将走向计算机而不是去实验室。”③ 1976年，日本的量子化学家大野公男认为：“薛定谔方程是支配整个化学领域的基本法则，”④ 不过，还有相当多的量子化学家，如美国的鲍林，美国的柯尔逊（Coulson），瑞典的劳丁（Löwdin），日本的福井谦一，他们强调化学的经验知识，不同意过高地估价量子力学和计算工具在发展化学理论中的作用⑤。

自不待言，正象量子力学诞生之前化学的发展和物理学在化学领域的应用促进了物理学的进步那样，量子化学的发展日益丰富和深化了量子力学多体问题理论的内容。但本文限于从科学史和方法论的角度考察量子力学和化学经验在量子化学这门化学理论中的作用。这种讨论，对于制订量子化学的发展战略和展望它的前景以及改进我们的量子化学教学都是有益的。

量子化学的产生

量子化学不仅是现代物理学的实验方法和理论不断渗入化学领域的结果，而且是化学科学本身逻辑发展的产物。

道尔顿化学原子论出现之后，逐渐形成了关于物质构造三个层次的观念，即宏观物体——分子——原子，化学现象被归结为分子的形成和改组。但分子不是原子的简单集合，而是一个结合能很高的物质系统；作为构成这个系统的各个组成部分的原子与孤立状态的原子是不同的，它们由于相互作用而改变了，成了系统的要素。而这样一来，在

---

① P.A.M.Diroc, *Proc.Roy.Soc*, A123, 714 (1929).
② W.海森伯：《物理学与哲学》，商务印书馆，1981年。
③ 《量子化学译文集》，上海科技文献出版社，1981年，25页。
④ 同上，151页。
⑤ P.O.Löwdin, *Int.J.Quant.Chem.*1, 7 (1967)；C.A.柯尔逊：《原子价》，科学出版社(1966)；L.鲍林：《化学键的本质》，上海科技出版社(1966)；K.Fukui, *Accounts Chem.Res.*, 4, 57(1971).

描述分子时就发生了困难，因为自然科学理论总是把某种不变的东西作为出发点。所以，要认识分子的性质，要认识分子的各个组成部分的相互作用和相互联系，即分子结构，就必须深入到比原子更低的层次。而电子的发现恰恰为这种认识提供了契机。相对分子系统来说，电子是不变的实体。

实际上在古典结构理论创建初期，原子价的可变性就使试图把分子的全部性质看作是从它的初始微粒，即原子派生出来的观念发生了困难；原子价到底是原子的固有属性还是和它的化合状态有关，首先引起激烈的争论。在十九世纪末二十世纪初，化学在一定程度上也经历着理论的危机。路易斯等人的电子理论把关于价键的电子本性问题提出来了，但问题并没有解决；用伦敦的话来说，就是“基本现象本身仍旧不了解。”①

的确，量子力学为探讨分子系统中的电子运动提供了可靠的理论基础。但必须看到在量子力学诞生之前，通过对化学实验资料的概括，已经为量子化学作了一定的理论准备。以VB理论来说，可以从路易斯一朗缪尔的电子论，追溯到1878年美国的克利福德和西尔威斯特利用古典结构概念和不变量代数理论的形式化类比而提出的分子的数学模型②，追溯到1865年法国的德兰沃德（Delavaud）试图解释变价和奇偶数价原因的分子模型③。在1919年兰米尔从电子对概念来探讨N_2等分子的电子结构时，已经类似处理原子的满壳层结构那样来处理多核的分子系统，并实际上提出了等电子原理④，从而有了MO理论的思想雏型。

量子化学发展离不开化学经验

文献中常常把量子化学的产生说成是把量子力学处理原子结构的方法移植到分子结构。的确，1927年海特勒和伦敦的开创性论文，是把海森伯对氦原子双电子体系的简并态微扰处理移植到氢分子。但VB理论是在此之后，通过许多人的努力把海特勒-伦敦处理氢分子的方法推广到更复杂分子才建立起来的，而这种努力离不开化学经验。

事实上，海特勒一伦敦1927年对氢分子的量子力学计算并不完善。为了改进计算，1928年留美的中国物理学家王守竞提出了原子轨道收缩的概念；1931年罗森（Rosen）引入极化轨道；1933年韦伯姆（Weinbaum）引入离子项波函数。柯尔逊认为：“这些运算还不仅是数学性的，每个运算代表着引入化学直观与化学经验的一个方面……所用的数学计算形式几乎不可避免地由实验结果引起的。”⑤

也许，使鲍林产生杂化概念的第一冲动是他受薛定谔1926年处理氢原子斯塔克(Stark）效应的启发。但从他1928年公开发表的一篇简报来看，促使他提出杂化概念的最重要的因素是出于对碳原子有四个等效单键这个化学经验的思考⑥。

这里说到的化学经验，一是指化学实验资料，二是指从实验资料经验性地总结出来的概念、规律，包括经典化学的一些合理观念。后者是比实验资料高一层次的化学知

---

① 转引自B.U.Kyэнечов., *Разечтие Ччениэо Васентности «Химии»* (1977) .C, 125.

② И.С.Дииtрнев, *Илр вопросй истории и методологии химии*, «ленинтрадского чиие» (1978) .C, 12.

③ 同①。

④ I.Langmuir, J.A.C.S., (1919) 41, 868.

⑤ 见第8页②。

⑥ L.Pauling, Proc Nat, Acad, Sci.U.S.14, 359 (1928).

识，它对建造比经验规律又高一层的理论规律是更直接的基础，是发展量子化学特别值得珍视的东西。

不容忽视，量子化学的许多新概念可以在经典化学中找到它的胚胎，甚至是渐趋成型的东西。一个典型的例子是共振概念。又如MO理论关于分子的整体性观念和类型论的一元学说是一致的。艾林（Eyring）的过渡态理论可以在1922年伯斯坦（Bröstend）的学说中找到它的雏型，而后者又可以追溯到十九世纪末就已出现的关于化学反应中间体的概念。

VB理论中由1928年伦敦开始的理想配对近似方法，实质上是用量子力学语言表述的路易斯理论。通常讲述的VB理论一般的数学处理方法是斯莱特（Slater）1931年提出来的。这个方法固然是他1929年处理多电子原子结构方法的推广，但这种推广的物理思想正如他1931年1月的论文所表明的那样，是依据了化学经验①。

MO理论的产生始于马利肯和洪特对分子光谱的量子力学解释。但这种解释现在已没有多大价值了，而且在当时就受到赫伯格（Herzberg）、利纳德-琼斯*等人的激烈批评。作为MO理论定量计算基础的原子轨道线性组合方法（ACLO—MO）是1929年利纳德-琼斯明确提出来的。在他的论文中，涉及了许多化学经验的材料。② 这是一个方向性转变：由此开始，一些试图用单电子波函数来描述分子的量子化学家把目光转向传统的化学问题即化学键的讨论。例如休克尔（Hückel）从1930年开始提出简单的MO理论（HMO）来解决芳香性分子的稳定性问题，并讨论了取代基的定位效应；1931年洪特提出σ键和π键的概念；1932年马利肯讨论了有机化学的共轭效应和超共轭效应。"分子轨道"一词就是马利肯在1932年首先提出来的③。默雷尔（Murrell）等人说："分子电子结构的分子轨道理论是原子结构轨道理论对分子的自然推广。"④ 但这种推广的基础是化学经验。

量子化学对经典化学的继承性

说量子化学发展离不开化学经验的另一个理由是：量子化学的发展对经典化学有明显的继承性。它不仅表现在量子化学采用了或部分地采用了经典化学的实验资料和经验规律以及术语，量子化学的许多新概念可以在经典化学中找到它的胚胎，还表现在：

（1）量子化学和经典化学的发展过程有许多相似性。VB理论从定域到离域的发展在一定程度上是重复了经典结构理论的发展。后者的产生是以定域、双中心键的观念为基础的。可是，从苯分子开始陆续发现了越来越多的"例外"分子，从而出现了余价说，中间阶段说和早期的中介说，MO理论中首先提出的整数或半整数的键级；尔后在1939年柯尔逊提出了分数的键级及1947年他和朗尤特-希金斯（Longuet-Higgins）提出分数的自由价概念。从总体上说，量子化学和经典化学首先着重研究的都是静态分子的结构，以后对反应性能和反应机制的研究才兴盛起来。

---

① J.C.Slater, *Phys.Rew.*, 38 1109 (1931); 34 1293 (1929); 37, 481 (1931).

* Finkelslein和Horowitz在1928年曾用AO的线性组合来表示H_2^+的近似函数。

② J.E.Lennard-Jones, *Tras, Farad, Sou*, 25, 668 (1929).

③ R.S.Mulliken, *Phys.Rew.*, 41, 49 (1932).

④ J.N.默雷尔，《原子价理论》，科学出版社，1978年，148页。

（2）量子化学的理论形式总是这样或那样地受到化学家既有的即经典化学观念的影响。在MO理论中定域化MO的不断出现和在四十年代包含了键级、自由价、电荷密度等结构要素的分子图的出现，VB理论中以杂化轨道代替孤立原子的原子轨道和共振论采用经典的结构要素等，都说明了这一点。

量子化学对经典化学的继承性，反映了它有不同于量子力学的发展逻辑。这种继承性主要是它们的研究对象（研究的物质客体和所要解决的科学问题）的一致性所决定的。

量子化学不能归结为量子力学

在物理学中，力学研究质点，电动力学研究电磁场，统计力学研究系综，热力学研究热力学系统。但化学不能作这样的抽象和简化，所要研究的是千千万万种具体化学实物的结构性质及其相互转化。化学研究对象的这种具体性和复杂性，决定了它过去长时期是一门归纳、经验的学科。量子化学利用求解薛定谔方程的统一方法，从电子层次来研究化学系统。与经典化学相比无疑具有多得多的演绎成分。就讨论电子运动而言，量子化学与量子力学有共同之处。但是，量子化学不是象量子力学那样以最纯粹、最基本的形式来研究电子运动，而是研究无限多样的具体化学系统（如分子）中的电子运动，因而不可避免地需要归纳。

苏联一些学者指出：量子力学和量子化学代表了科学认识发展的两种不同形式。前者是从概括实验资料开始，以提炼出新的科学原理而结束的发展过程，后者则是把既有的科学原理（量子力学）推广到新的领域（化学），而导致出现新的理论体系①。

实际上，量子化学并不是量子力学简单地应用到化学领域的产物，而是量子力学的原理和化学经验以独特的形式"杂交"的结果。在这个过程中它通过概括经验材料形成了一系列新的概念和原理，从而表明它在质上是与量子力学不同的理论体系。即使对于氢分子这样简单的分子的量子计算也需要有并不包括在量子力学中的假定。这些假定和由此发展而成的原理的提出和验证，还是要依靠化学经验。

在量子化学中，不仅各种各样的定性概念和半经验计算方法是和化学经验相联系的，而且从六十年代兴盛起来的从头计算也并非真正的"非经验计算"。例如，它要利用分子的对称性来简化计算，这种对称性是靠实验了解到的而不是从量子力学推究出来的。又例如基函数组的选择在很大程度上是靠计算者的经验而不是量子力学规则。这里所说的经验是以和实验数据的比较为基础的。

化学系统的属性不是它的各个组成部分的简单加和，整体不能归结为部分。化学现象的特殊性不在于分子中的电子和原子核运动规律与量子力学中的有什么不同，而在于分子的系统性质，在于与这种多核系统（多中心场）的结构相一致的，这些更小微粒的相互作用在整体上出现了新的特点。对于较复杂的分子，目前还看不出量子力学能仅仅根据它有多少个原子核和多少个电子来确定它的结构和性质，只就异构现象来说，仅仅把分子看作一个物理学系统难以解决它的化学问题。

---

①А.А.Пененкин, *Метоболотических Проелемы Разеития Кеантовок Химии*, *Наука*(1976), В.И.Кулнецов, *Диалектика Разеития Химии*, *Наука* (1973).

近年来，人们常常谈到理论的还原问题。按照奈格尔（E. Nagel）《科学的结构》一书中提出的观点，如果理论A还原为理论B，那么理论A中的术语所表示的特性和理论B中的术语所表示的特性之间要有对应的关系（可连通性条件），并且能逻辑地从理论B的前提和规律推导出理论A的全部法则（可推导性条件）①。就量子化学现有发展水平看，看不出它能和量子力学建立上述关系。

个别比一般更丰富。决不能认为，通过演绎可以从量子力学获得微观世界的所有信息。量子化学不能归结为量子力学，这和核物理不能归结为量子物理的情况是类似的。

薛定谔方程不是"支配整个化学领域的基本法则"，而是支配化学系统中电子和原子核运动的基本法则。但是，懂得了砖块与粘土的性质和数量，不等于懂得房屋的设计和建筑学。薛定谔方程为解决化学的微观理论问题提供了一般方法，但这种解决的具体方式的确定仍然离不开化学的实验研究。不通过真实的实验而是通过理论计算来获取化学信息，这不过是体现了理论的预测功能。而这种计算方法的建立和验证还是要靠实验。

量子力学与化学经验相结合是发展量子化学的最重要方针

量子化学的历史表明：要发展量子化学，必须把量子力学和化学经验紧密结合起来。只有通过这种结合，更深刻更正确地揭示化学现象的规律，并发展能为广大化学家所接受的理论形式，才能体现量子化学的价值。量子化学的价值归根结底是能指导化学实验。而它的这一功能恰恰是推动它前进的最重要因素。

VB理论与传统的化学观念比较接近，易于被化学家接受。VB理论创建者的功绩，在于他们最先力图把量子力学和化学经验结合起来，用量子力学论证、阐述了经典结构理论的一些结论，发展了杂化、共振、电负性等一系列新概念，对化学实验起了一定的指导作用。由于这些原因，它较早地在化学家中传播，并先于MO理论发展起来。

但必须指出：第一，在创建VB理论的过程中曾有两个主要学派。一个是德国的海特勒、伦敦、韦尔、鲁默等人。他们注重数学问题，在当时哥丁根的"群精神"的影响下，曾首先利用群论来建立多电子体系VB波函数。但他们的理论（自旋原子价理论）在数学上太复杂，也很难从中发展出对化学键的定性解释，以后，除鲁默价图外，未引起量子化学家更多的重视。另一派的代表人物是美国的斯莱特和鲍林。他们注意发展理论的物理学和化学基础，结果影响较大。第二，VB理论在化学界中的影响，主要还不是由斯莱特建立并由鲍林等人加以完善的VB理论定量计算的一般方法，而是由他们发展的杂化、共振这样一些能进行直观讨论的定性理论。当然，前者是后者的理论基础。

1947—1949年间，柯尔逊、朗尤特-希金斯等人用HMO法及PMO法系统研究了有机共轭分子。大约从这个时候起，MO理论逐渐取代了VB理论的统治地位。究其原因，除了理论本身的成熟，电子计算机的运用之外，还由于和化学经验更紧密地结合，出现了大量的研究课题和需要，并在指导化学实验方面发挥了比VB理论更大的作用。近二十年来，MO理论在引起化学家重视方面有两个突出事件。一个是福井谦一的前线MO理论及伍德沃德和霍夫曼的MO对称守恒原理，在解释和预测化学反应方面取得卓越的

---

① E. Nagel, *The Structure of Science*, N.Y., p.130—137. (1961)

成功。但是，它们的出现并非依靠高深的数学推导，而是借助比较简单的MO理论（EHMO）对大量实验资料进行概括。另一件事是MO理论从头计算法的蓬勃发展。从头计算工作揭示了半经验方法中被掩盖了的许多化学信息，帮助确定它们的适用界限，使人们对化学键的本质取得更深刻的认识。因此，对于从头计算的兴盛，不能仅仅看到是由于机器帮助人们克服了计算上的困难，还要看到它对化学实验的指导作用是促进它发展的强大因素，看到光电子能谱等实验为它提供了有力的支持。

目前，量子力学还是个庞杂的理论系统。在MO理论和VB理论这两大派别的框架内，实际上包含了各种各样的理论和方法。它们可以按照另一种方式来划分，即定量的计算和定性的讨论，而定量计算中又可分为严格的"非经验"计算和近似的半经验计算（当然，在这种划分中实际上存在不同等级的过渡类型和它们的相互交叉）。严格地按照基函数的完全系来进行分子计算，在实践上是无法完成的。所谓"从头计算"，实际上仍然是个近似方法；把它说成"非经验"的只是指它不采用经验参量。所有的量子化学理论都或多或少地融合着化学经验。值得注意的是：定性的理论，半经验的近似方法，虽然经验成分较多，但在指导化学实验方面却至今仍起着重要的作用。

MO对称守恒原理就是个定性理论。在它的两位发现者当中，伍德沃德长期从事有机合成，熟悉化学实验资料；而霍夫曼是位著名的量子化学家，深明量子力学理论。他们对量子化学共同作出的杰出贡献，是量子力学与化学经验相结合的成功例证。

结　束　语

鲍林在总结杂化理论时写道：sp轨道"特别适于描述游离的碳原子，如果量子理论不是由光谱学家而是由化学家所发展，则在理论中起主要作用的，可能是下述的四面体型轨道而不是s和p轨道。"[①]这段话发人深省。按原意说，就是对于物理学家的游离碳原子和化学家的处于化合状态的碳原子，波函数的描述应该有不同的形式。进一步说，对化学系统中电子运动的描述应该有不同于原子系统的形式和内容。

应该怎样寻求达到这个目标的途径呢？我认为经典化学是个重要的信息来源。由于研究对象的一致性，在研究方法上量子化学和经典化学也应该存在共性。

化学研究的对象有个特点，即存在组成和结构上有某种共性的物质种类或系列，如共轭分子、络合物，如同系物以及由不同取代基产生的衍生物。与经典化学类似，量子化学在根据量子力学基本原理来研究化学物质的结构与性能时，是利用了这一特点的。这是个值得继承的方法传统。

经典化学是把分子的属性归结于组成它的原子。量子化学中，VB理论较多地保留了这个观念；而在迄今最严格的MO理论即HFR方程中好象是能把分子看作由核和电子组成的物质系统。乍看来，HFR方法提供了关于分子的最简单的描述，然而，实际计算却是极其烦难的。实际上，HFR方法采用AO的线性组合来建立MO，表明它并没有离开"分子中的原子"这个观念。在MO自洽场近似方法（如CNDO）中，把HFR方程中的矩阵元Fuv所反映的电子运动特性部分地归结为原子轨道Φu和Φv所属原子的固有属性；而在简单的MO理论即HMO中，则把Fuv完全归结为原子属性。它们的成功，证明

---

① 见第450页⑤。

"分子中的原子"是个很有价值的观念。VB理论在数学计算上的困难不在于它较多地保留了这个观念，而在于它以固定的模式（电子配对）把电子的运动从属于原子的特性。关键的问题是：应该根据量子力学的理论研究和对化学经验材料的概括，按照研究对象的类型和具体要求，把电子运动的一些特性适当地简化为原子的量子力学属性。而在这方面，LCAO—MO概念提供了一个好的逻辑起点。

在量子化学半个世纪的历史中，前半期的特点是提出了大量新的概念，后半期则重于数学计算，按威尔逊的话说是"的确没有什么新颖的思想"①。这是值得思虑的问题。近二十年来的分子计算工作确实取得很大成功，却变得越来越繁难复杂。尽管计算技术日益完善，而实验室中遇到的化合物种类和新的反应类型也在飞速增加。结果是机器计算仍然赶不上化学家的需要。但是，分子计算已经积累的如此庞大的数据资料使人们期待：借助对这种"新型的经验材料"的概括，提炼新的概念和原理，建立新的计算方案。

不应夸大量子力学在量子化学中的作用。纯粹的量子力学计算不能回答任何真正的化学问题，把量子化学仅仅看作是量子力学多体问题近似计算的知识体系是不确切的；把它说成是仅仅用量子力学的方法来研究化学问题也是一种片面的观点。人们在思考量子化学的发展战略和从事量子化学教学时，不应忘记它的发展离不开化学的经验知识，不应忘记从经典化学的观念和方法中吸取营养。量子化学的核心不在于量子力学计算的数学技巧，而在于从电子层次上揭示化学现象本质规律的新概念、新原理。量子化学家不仅要有坚实的数理基础，还需要有丰富的化学经验知识和为化学实验服务的明确目标，努力解决化学实验工作所面临的各种紧迫的理论问题，并把自己的研究成果转译成一般化学工作者易于接受的语言。为了把量子化学推向前进，应该在不断上升的水平上，把量子力学和化学经验更紧密地结合起来，发展不同等级、不同形式的量子化学理论。

熊 汉 绪

2.分子轨道理论的哲学探索

1981年10月19日，瑞典科学院宣布：把1981年诺贝尔化学奖授予日本化学家、京都大学教授福井谦一和美国化学家康奈尔大学教授霍夫曼（R.Hoffmann）。同时指出："福井谦一和霍夫曼的理论，是我们认识化学反应过程发展道路上的里程碑。"

福井谦一的理论叫"前线轨道理论"。霍夫曼的理论叫"分子轨道对称守恒原理"。他二人的理论内容相似，结论相同，应用范围一样，都是用于处理化学反应历程和化学反应中化学动力学问题的，所以二人分享了诺贝尔化学奖。他们的理论是分子轨道理论发展的新高峰，受到举世注目。

分子轨道理论的发展经历了漫长的历史，对我们有许多哲学启示。

---

① 《世界科学译丛》第一辑，上海科技文献出版社，1978年，89页。

轨道概念的历史发展

轨道这个词，至少可以追溯到科学的启蒙时代。古希腊的亚里士多德就曾经提出过：宇宙天体都是沿着以地球为中心的轨道作圆周运动。伊壁鸠鲁曾经提出：原子本身，不仅做直线运动，而且还会沿着偏离直线的斜线轨道运动。轨道一词的原意，是指应当遵循的固定路线。我国古代有人提出，轨道就如同“车行之依轨辙”。在西方科技著作中，很早就开始使用轨道这个概念。例如，1543年，哥白尼在《天体运行》这本书中就提出：地球是沿着“完美的”圆形轨道绕日运行。后来，刻卜勒又把哥白尼的圆形轨道修定成椭圆轨道，并总结出行星运行的三定律，成功地解释了一系列的天文现象。

哥白尼—刻卜勒的太阳系行星轨道模型，在以后的自然科学中，产生了深远的影响。

1911年，卢瑟福试图解释α粒子的散射现象，他受“大宇宙和小宇宙相似”的哲学思想的启发，用相似和类推的办法，构造了一个微观原子结构模型。他设想，原子由占有整个原子绝大部分质量的核和电子组成，原子核如太阳，电子如行星，电子绕核运动，如同行星绕日运动。此后，轨道概念就从宏观进入了微观。

卢瑟福的原子轨道行星模型提出以后，也曾成功地解释了一些现象，但有许多缺陷。1913年，玻尔又对卢瑟福的模型进行了修改和补充。但是，由于他把微观粒子的轨道仍然理解为宏观的确定路线，用经典物理学的力学理论加上量子条件来处理原子，因此还存在着许多问题，例如，他就无法解释氢原子光谱的精细结构。到本世纪二十年代以后，由于德布罗意、薛定谔、海森堡、狄拉克等人的共同努力，逐步建立了原子结构的量子力学模型。在这个模型中，原子核外电子运动轨道的含意，已经大不同于宏观轨道概念；微观原子中的轨道，再也不是宏观轨道所描述的那种确定路线，而是指电子在原子核周围的几率分布，是电子在原子核周围运动的状态函数。

以量子力学为基础的原子结构模型所确定的新的原子轨道概念，客观地反映了微观粒子运动的规律，因而能比较圆满地解释微观现象，取得了巨大的成功。

分子轨道理论的建立和发展

人们对微观粒子运动规律的认识是在不断深化的。人们真正认识了原子轨道之后，自然会想到：既然原子有轨道，那么分子也可能有轨道。这个大胆的推想，后来得到科学上的证实。1927年，海特勒和伦敦，成功地用量子力学方法处理了氢分子，确定了电子在氢分子中运动的轨道，这就是最简单的分子轨道。此后，人们又逐步认识到各种化合物的分子轨道。

人类认识原子轨道和分子轨道，是为了研究它们的行为，从而解释和预见各种物理现象和化学现象，并把握其规律。

很早，在化学上人们就注意到这样一个事实：在原子和原子起变化的时候，主要是原子的外层轨道起作用，而内层轨道一般保持不变。不同原子的外层轨道周期性的变化，体现出各种化学元素性质周期性的变化。总之，决定各种化学元素原子的化学行为的关键因素是原子的外层轨道。

根据以上的事实，福井谦一用相似和类推的办法想到：原子起变化时是外层轨道起作用，那么，分子在起化学变化时，会不会也是外层轨道起作用而内层轨道保持不变

呢？他经过长期苦心钻研，终于发现，确实如此！

福井谦一把分子中已被电子占据的最高轨道（离核最远而又有电子的轨道）和未被电子占据的最低空轨道（没有被电子占据的所有可能的轨道中能级最低的轨道）统称"前线轨道"，一个有电子，一个没有电子的轨道，即分子的外层轨道。他证实，在分子发生化学变化时，并不是所有的分子轨道都发生变动，而仅仅是前线轨道发生变动，其它轨道一般不变动。福井谦一把他用相似和类推获得的这一理论，称之为前线轨道理论。这个理论，圆满地解释了以前化学理论无法解释的许多化学反应历程。如，有机化学中电环合反应，环加成反应，σ键迁移反应等等。福井谦一的理论1956年公开发表，这一理论标志着人类从认识原子轨道的化学行为，进而认识到分子轨道的行为。

几乎是在福井谦一建立前线轨道理论的同时，霍夫曼和他的老师与同事伍德沃德也从不同的角度对一系列的协同反应历程进行了研究。

霍夫曼作为一个化学家，他对原子轨道非常熟悉，他深刻地懂得：原子的各种轨道，都有十分和谐的对称性。于是，他又从对称性的角度系统考察了分子轨道。他研究了大量的实验材料，发现分子轨道和原子轨道类似，也具有不同类型的对称性。在分析合成维生素B_{12}和其它一些复杂有机化合物中所遇到的一些问题时还发现，分子在进行协同反应时，反应物分子轨道的对称性和生成物分子轨道的对称性有着紧密地联系。他惊奇地发现：在协同反应中，反应物和产物分子轨道对称性一致时，反应就容易进行，他把这种情况称为"对称性允许"；反之，反应物和产物分子轨道对称性不一致时，反应就不易进行，他把这种情况称为"对称性禁阻"。

伍德沃德和霍夫曼把上述规律称为"分子轨道对称守恒原理"。现在，化学界也把这一原理称为"伍德沃德-霍夫曼法则"。这个法则，在大量实验事实的基础上，抓住了分子轨道对称性这一关键因素，进行了综合性研究，得出了具有普遍性的结论。这个法则能够有效地判断化学反应可能进行的方向和产物，并以其独特的方法开创了一条研究化学反应的新道路，无论在实践上还是在理论上，都有重要的意义。化学界一致认为，这个原理是有机化学和量子化学理论的一颗明珠。

分子轨道理论的哲学启示

所谓分子轨道，现在不过是指分子中的电子有一系列的可能的运动状态，每一个运动状态可以由一个波函数来表示，这个波函数叫分子轨道函数，简称分子轨道。波函数可以由量子力学计算得到，而波函数在空间各点的不同值，以及在不同的区域或者取正，或者取负，可以大致用相应的图形表示出来。电子在分子中排布时，尽量先占据能级较低的轨道。在简化了的分子轨道理论中，把分子轨道看成相应原子轨道的组合。若分子轨道比相应的原子轨道能级低，就形成成键分子轨道；若分子轨道比相应的原子轨道的能级高，就称为反键分子轨道。不同的原子轨道组成分子轨道时，要遵从以下三个原则：（1）各原子轨道的能量要彼此近似或相同。（2）各原子轨道，在可能的范围内要最大限度的重叠。（3）对称性相同的原子轨道，才有可能有效地组成分子轨道。

原子以一定的法则结合成分子，小分子又以一定的法则结合成较大的分子，或者分子本身以一定的法则由一种形式变成另一种形式。这是自然界演化发展的重要阶段，也是物质存在形式和运动状态的重要质变。这种变化所遵循的法则所具有的很大的普遍性，

给我们提供了重要的哲学启示：

（1）分子轨道理论表明，成键的双方，轨道的能量要相似或相同，要彼此"门当户对"。例如，1s轨道往往只能和1s轨道或p轨道相匹配，很难和d轨道或f轨道相搭配。这说明，客观事物决不仅仅是"相反相成"的，在一定程度上，还表现出"相似相成"。

所谓"相反相成"是指矛盾的双方有对立的属性，才能构成统一体，具有同一性；"相似相成"是指矛盾的双方有某种共同的属性，有某种相类似的特点，才能构成统一体，具有同一性。分子轨道理论表明：我们必须把"相反相成"和"相似相成"统一起来考虑，才能解释分子轨道的化学变化。强调一方，忽视另一方，都是不对的。

班固著《汉书》时提出了"相反相成"的观点；但在《史记》中却有人提出，"同恶相助，同好相留，同情相成，同欲相趋，同利相死。"这是讲的"同情相成"、"相似相成"的道理。

我们是辩证论者，所以我们是"相反相成"和"相似相成"的统一论者。

（2）对称方法是现代科学的重要方法。

对称和它的反面对称破缺（即非对称），最早是作为美学原则而受到重视的。美学的最高原则是和谐，而对称则是和谐的重要基础。

随着人类认识的发展和科学技术的进步，人们的对称概念也有了发展，从美学的形象对称，逐步发展到思维中和理论中的泛对称。如物理学上的粒子和反粒子的对称，电磁不对称，CPT原理的发展，广义相对论的对称解等等，都早已超越了形象对称的范围。其它像数学、天文学、地质学、生物学都广泛地运用对称性的方法进行科学探索。

在化学中，起初也是研究形象对称，如结晶化学中，离开对晶体的对称性研究，可以说是寸步难行。分子轨道对称性原理的提出，把在化学上运用的对称性方法推进到微观粒子的运动轨道中，这在方法论上是个重大的突破。

对称和对称破缺，现在已在自然科学中形成了一对普遍性的矛盾。有人认为，对称是"变化中的不变"，对称破缺则相反，这种说法有一定的道理。实际上，对称是物质存在形式中，无论是绝对运动还是相对静止中，普遍存在的对应性，而这种对应性的丧失就是对称性破缺，就出现非对称性。自然界中，对称和非对称的矛盾运动具有普遍性，因而在自然科学中也具有普遍性，所以它就成了自然科学的普遍的方法。

（3）现代化学强调研究反应过程。

分子轨道理论是化学发展的最新成果之一，它所研究的不是相对静止的现象，而是研究微观领域中，分子轨道运动变化的方式和途径。这就提醒我们：现代化学已从只注重研究化学物质在化学反应中始态和末态，转而研究化学反应的全过程。

苏联化学家日丹诺夫认为：人们仅仅研究化学的始态和末态，那是研究"化学反应的灰烬"，研究过程才是研究"化学反应的火焰"。这种说法是很深刻的。

目前，分子轨道理论还在不断发展中。我国化学家已把分子轨道理论推进到一个新的高度，他们在能级相关的基础上，提出了一个简化了的模型，并用这种模型计算了一系列的协同反应中能级变化的情况，还试图给出反应活化能的定量数值。同时，他们还从理论上推导出了催化对称禁阻反应时，催化剂所应当具备的条件，这就对人们在实际工作中，选择催化剂，提供了理论依据。他们的工作，受到了国内外专家的好评。

王 德 胜

3. 计算化学的哲学问题

计算化学是计算方法和计算机在化学各领域中的应用。在量子化学中计算机的应用最为需要，计算工作量也很大，它是近二、三十年发展起来的一个化学新领域，是量子化学研究的前沿之一，它的诞生和发展不仅具有重要的科学意义，同时也具有重要的哲学意义。

计 算 机 应 用 于 化 学

1927年量子化学的诞生，预示了化学研究定量化计算新时期的到来。但是，由于求解多核多电子分子体系的量子化学方程是十分复杂的，所以，在量子化学发展的最初二十多年中，一直没有能够真正解决精确的理论计算问题。例如，当采用原子轨道线性组合进行分子轨道从头计算时，遇到积分数目与电子数目四次方成正比的多中心积分，这种积分的人工计算是很困难的；而且，一个由二十个原子组成的分子就可能包含一百个电子，所需计算的积分数是一亿个，更是人工计算无法胜任，这就使得量子化学计算在一段时期里没有取得较大进展。直到五十年代，除了个别很简单的分子进行了较精确的从头计算外，另外的一些小进展都是用经验法或半经验法作出的，关于分子性质的有意义的量子化学计算难以得到较好结果。量子化学要深深扎根于化学的各个领域中，就有待于计算上的突破。

借助于电子计算机技术飞速发展，快速准确计算技术的应用，到了六十年代，量子化学计算已跨入了非经验的分子轨道法（即从头计算法）时代，对复杂分子进行较严格的量子化学计算成为可能。例如，在五十年代中期对氮分子这样的小分子施行从头计算时，竟要用去两年时间才会求得预期结果；在六十年代中期，把这种小分子的计算程序输入大型电子计算机里仅仅需要一两分钟就可以得到相同结果。电子计算机技术打开了量子化学的计算难关。“忽如一夜春风来，千树万树梨花开”，从而开创了量子化学发展的新局面，同时也就诞生了计算化学这一边缘学科。

计算化学，对小分子的从头计算，目前已可使计算结果达到相当高的精确度，计算结果往往可以与实验结果媲美；对中等复杂程度的分子作计算，所得结果也可达“化学的”精确度（如对分子能量的计算精度达±1千卡/摩尔），对大分子的计算也取得了一系列显著的进展，甚至在利用统计平均方法的情况下，对DNA这样的大分子，从一个包含180个水分子的螺旋段试行了从头计算。另外，考虑了相对论效应的量子化学计算也开始有所实施。计算化学，不但在传统的无机化学、有机化学等化学领域里大显身手，而且已渗透到天体化学、生物化学、量子药理学等化学边缘学科领域，对探讨天体演化、分子的生化活性、酶催化反应的机理、化学致癌原因等方面问题都起着重要作用。

当前，电子计算机及计算技术的发展方兴未艾，其一是计算机容量、速度和功能不断提高；其二是程序理论、计算方法的不断进步；其三是计算机造价、计算所需费用不断降低。可以乐观地展望在不远的将来对相当大的分子也容易计算，这就推动化学科学在定量地进行理论研究和指导技术实践上翻开崭新的篇章。

在历史上，化学学科的体系经历了几次革命性的飞跃，这些飞跃都是由于新的学说

和理论的建立以及实验技术的革新所引起的。计算化学的诞生和发展，尤其是基础理论研究和实验技术、计算技术互相渗透的结果，它从一个侧面突出地表明：新技术手段是决定现代科学发展的重要物质基础，生产向科学研究提供什么样的仪器和设备在很大程度上决定着科学发展的速度和水平，当技术上有重要突破时，必然大大地推动自然科学研究的发展。

计算中的近似方法

计算技术在处理多核多电子的分子体系的实际问题中，不引入近似就不太可能求解分子的量子化学方程。众所周知，分子作为一个整体是由电子和原子核组成，在体系中原子核质量比电子质量大数千倍以上，因而电子运动速度将比原子核运动速度快得多，这就使得当核间发生任一微小运动时，迅速运动的电子都能立即进行调整，建立起与变化的核力场相应的运动状态，这意味着在任一确定的核的排布下，电子都有相应的运动状态，而且核间的相对运动可视为对电子运动的平均作用。正是依据这种物理思想，使分子中核的运动和电子运动分离开来进行考虑，从而抓住主要矛盾，建立了称为绝热近似的量子化学基本方程。然后再在构成分子波函数的方式上相应采取进一步近似，最常用的是单电子近似。在多电子体系中，所有的电子是相互作用的，其中任一电子运动依赖于其余电子的运动；单电子近似，把所有电子对每个个别电子运动的影响代换成某个有效场，每个电子在核电荷及其余电子有效场产生的势场中运动并且仅仅依赖于电子坐标，从而在多电子体系中每个电子可以引入单电子波函数。单电子波函数的乘积构成分子波函数。

引入以上两个基本近似后，就可以进一步探讨量子化学计算问题。在价键法和分子轨道法中，价键法偏重于反映分子的局部性质，而且在数学上的处理是相当复杂的；分子轨道法能较好地反映分子整体的性质，而且数学处理比较简单。使用分子轨道法时容易编制电子计算机程序，能很好地适应电子计算机的能力。分子轨道的从头计算法，现在已成了计算化学的主流。该方法是估计一个单电子波函数的乘积代入量子化学基本方程，依次对每个单电子包含在方程中的全部积分做精确计算，完成对所有单电子的一组计算后，由近似向精确靠近一些，然后再把这组结果迭代回原方程中，通过一次又一次的迭代，近似解向精确解逐次逼近，直到从一次迭代到下一次迭代时几乎不再有进一步的改进为止，最后一组轨道给出分子波函数。在整个计算过程中，不直接使用被计算分子的实验资料。六十年代这种从头计算法只用来讨论一些小分子，到七十年代已用来计算一些由数十个原子包含几百个电子的分子。

但是，计算化学要广泛应用，特别是对一些极其复杂的大分子体系，仍需大大简化计算，诸如HMO、EMHO、CDNO、MINDO等庞大的半经验量子化学计算方法仍然显示强大的生命力。半经验方程中，保留了从头计算精确研究给出的一些基本相互作用和效应以及基本概念，它不以描绘个别分子的全部基本特征为主要内容，而是着眼于粗略地考查分子中相互作用，比较同系物的某些规律，放弃对大量积分做精确计算，代之以一些实验数据或有明显物理意义的参数，通过计算得到复杂化合物结构的定性或半定量资料和分子中某些方面某些特征的变化信息。有些场合，这样的计算甚至是把个别分子的整体划分成若干个部分来分别进行的。另外，象介于从头计算法和半经验法之间的

Xα近似法等方法也显得很有前途。

从上述的计算化学的近似方法中，我们试作一些哲学分析。

我们知道，就单个分子体系来说，它是一个由电子和原子核共同组成的复杂整体，电子之间、电子与原子核之间、原子核内的核子之间存在着相互作用，是一个复杂的矛盾体系。面对这样的复杂体系，人们在实践中从客观实际情况出发，根据人们的实践需要，对复杂的整体进行解析研究。计算化学中，一开始就把原子核运动和电子运动分开来考虑，把分子波函数整体作为单电子波函数的乘积来考虑，于是在复杂的矛盾体系中抓住了矛盾的主要方面，把复杂的事物抽象为简单的规定，从而化繁为简，从简人手，逐步解决复杂问题。这种方法也就是正确运用近似去处理好整体与部分的辩证关系的一种方法，它在构成计算化学的数学基础和计算化学的计算过程中的作用都是有关键性意义的。

计算化学中的近似方法还在于，在一定条件下引入了恰当的近似后，再促使近似向精确的转化。计算化学中引入近似既使一般量子化学方程简化为现代计算机技术可求解的方程，这样的近似又是引向精确结果的起点。近似向精确的转化经历一个过程，这个转化过程中每一步都是近似的，但是近似性中有精确性的因素，经过一系列由近似向精确逐次逼近的过程，近似转化为精确，最后的精确结果中仍然包含着近似的成分。这个过程生动地体现了精确性和近似性的辩证统一。

我们还可以从计算化学的近似方法中体会到，数学方法的引人使计算化学取得了巨大的成功，但是，计算化学是多学科互相渗透的产物，化学问题并不单纯归结为数学问题，化学的理论思维也不会变成单一的数学思维。同时，计算化学的计算过程中也是往往运用着实验数据、经验参数，从而在计算中也直接与分子的实验的物理和化学性质相联系。

密切了理论与实验的关系

马利肯在1966年获诺贝尔化学奖的演讲中指出："计算化学家的时代即将到来，那时，若不是成千也是上万的化学家，为了化学信息中日益增加的许多细小侧面，将走向计算机，而不是去实验室。"① 的确，计算化学应用在分子结构方面，计算分子的电子构型与几何形状，从而得到电子能级、结合能、解离能、电子云分布以及其它有关的一些分子性质，解释各种光谱和波谱，并可与实验相互印证。例如，射电天文学已在星际中探测到约60种分子，其中许多分子未曾在实验室中发现过，但是，运用计算化学的理论计算，比较在探测中纪录到的光谱和实验室产生的光谱，从而确定了分子。炔基（C≡C—H）、甲酰离子（CHO^+）、质子化的氮分子（N_2H^+）、硫代甲酰离子（HCS^+）等等都是由这种方式首先发现的。再一个著名事例是，六十年代初，考虑了相对论效应校正和绝热近似校正后对H_2平衡解离能De计算得到的De/hC（h是普朗克常数，C是真空中的光速），计算值与当时被公认的实验值有$4cm^{-1}$的偏差，引起了理论界的很大震惊，直到1970年才报道了对H_2的光谱重复研究得到的新的实验数据，结果证明了计算化学的正确预见。计算化学的模拟实验计算可走在实验室工作的前面，甚至

① 《量子化学译文集》，上海科学技术文献出版社，1981年，25页。

可以纠正实验的偏差，弥补实验精度的不高，体现了理论研究、理论计算对实验的指导作用。

通过计算，可以从静态上阐明实验，从静态上指导实验，从静态上对实验结果作某些补充。尤其引人注目的是，计算化学在从动态上研究化学反应中起着重要作用。计算化学可以描述快速反应过程，譬如说详细描述分辨力为10^{-12}秒的红外激光也跟踪不了的化学键形成和破裂的快速反应过程；计算化学通过对分子激发态和不稳定分子特别是自由基性质的计算，对分子间相互作用进行计算并配合绘图仪器描出位能表面图，从而使我们有可能了解反应过程的细节。我国化学家唐敖庆在七十年代对国际上分子轨道对称守恒原理中三个学派进行批判继承和创新的过程中，提出了分子轨道图形理论。这个理论根据分子在化学反应中的运动图像，把原子间的相互作用以反应座标的函数来表示，通过计算对于引起化学反应的能力、配位性、立体选择性和反应途径进行研究，从而把分子轨道理论从定性讨论阶段推进到半定量阶段，使得从动态上描述化学变化有了新的进展。这种对动态的研究反过来又促进对静态的研究，对静态的研究和对动态的研究是互相渗透、互相促进、相得益彰的。而且，深入到动态研究，对实验手段就有了新的更高要求，从而进一步密切实验和理论计算的关系。

同样引人注目的是，计算化学不仅是计算方法和计算工具，而且可以进行图谱、已知反应等资料的存贮和核对，综合已有的化学知识，从而进行一定的逻辑推理和数学模拟，预示和设计未知化学物并选择合理的合成路线。例如，确定有特殊药理活性分子在传统上是一个周期长、代价高的过程，它涉及到数百种甚至数千种可能药物的合成，这之中每一种又必须是逐一试验之；但是，由于分子的药理活性经常在很大程度上与其π电子分布密度（键级）有关，与其分子构象有关，计算化学允许对颇大分子的这些性质进行有一定精确度的计算；通过计算，既可以指导药物设计、选择合理的合成路线，又可以进行预先筛选从而减少动物试验次数。分子设计已不是幻想，而且在多学科的协同作战中开始有所前进。

虽然，化学问题不归结为数学计算，数学计算不可能解决一切化学问题，理论预见的实现和检验都离不开实验，实验仍然在化学研究中占有基础的地位，但是，计算化学的出现，反映出化学历史上不曾有过的新情况，加强了化学理论对化学实验的指导作用，使得化学理论和化学实验的密切关系有了新的发展。这种新形势，体现了理论和实验的辩证关系的具体性和历史性。

向理论思维提出了新要求

十九世纪以前，化学囿于在自己学科中研究化学运动，长期处于经验科学的地位。十九世纪中，物理方法向化学研究中移植，使化学科学由仅仅是描述性和定性研究走向描述性和推理性结合，走向定性和定量结合，数学在化学中的运用突破了运用一次方程的水平。本世纪的化学保持和发扬了这种移植其它学科的方法协同化学研究的优良传统，数学在化学中的运用情况是大大地进步了。今天，各种数学诸如数理方法、线性代数、群论、图论、矢量分析和拓扑学等都在化学中发挥着自己的效用。数学化的方法，研究事物的量的方面的规定性，把各门自然科学贯通，从而引向深入认识客观事物的本质。马克思曾经指出，一种科学只有在成功地运用数学时，才算达到了真正完善的地

步。计算化学的诞生和发展，与整个现代科学数学化趋势一致，是化学科学进一步走向成熟的标志之一。

结合电子计算机的应用，计算化学已成为今日化学的各个领域中不可缺少的一个理论计算方法。值得注意的是，电子计算机原则上是按照人的指令去运行，按照人们编制的程序输出结果，在这个意义上计算机并不给出“超人的”信息。因此，如何探寻出解决问题的较好计算方案是有赖于理论思维的。而且，电子计算机给出的计算数字结果往往是十分复杂的，这要求我们运用科学概念、通过理论思维去把握去整理它，在分析整理中有所发现、有所创见。特别是，计算的数字结果也不可能无一遗漏地给出单个分子的所有结构和性能的信息，也不可能包罗万象地描绘出关于分子间反应方向和历程的所有信息。因此，不必担心化学研究会还原为数学计算。恰恰相反，这是对提高化学工作者的综合理论思维能力方面提出了新的更高的要求。恩格斯说：“人的思维的最本质和最切近的基础，**正是人所引起的自然界的变化**，而不单独是自然界本身；人的智力是按照人如何学会改变自然界而发展的。”① 计算机代替了人的部分脑力劳动，人从脑力劳动中更多地获得自由，就可以更多地投入创造性思维活动，这对促进化学以及各门科学的发展具有深远的历史意义。

曾国屏

4. 核化学的哲学问题

核化学是一门研究原子核反应和各种化学元素转变规律的科学。

核化学是从本世纪二十年代开始发展起来的学科。这个学科的出现，打破了化学的传统观念，为化学开拓了新领域。它不仅使化学认识深入原子核世界，发现了核反应规律，建立了新的理论体系，并进入了人造化学元素的新阶段。此外，核化学的形成和发展，还促进了物理学、化学、天体物理学、地质学、考古学、生物学等学科和农业、材料、能源等科学技术领域及医疗事业的发展。

核化学的迅猛发展已取得巨大的科学成就，为现代自然科学和哲学的研究提供了丰富的内容。

核化学的特点

恩格斯指出：“每一门科学都是分析某一个别运动形式或一系列互相关联和互相转化的运动形式的。”② “我们认识事物的基础的东西，则是必须注意它的特殊点，就是说，注意它和其他运动形式的质的区别。”③ 为了认清核化学与传统化学的本质区别，我们从核化学的研究对象和研究方法两个方面分析研究核化学的特殊矛盾和特殊规律性。

（1）核化学的研究对象

① 恩格斯：《自然辩证法》，人民出版社，1971年，209页。
② 同上，227页。
③ 《毛泽东选集》第1卷，人民出版社，1967年，283页。

传统的化学反应过程只发生在核外电子层，而且主要是最外层，与核本身无关。核化学的研究对象超出了这个范围，它扩大了化学研究的领域，从而使化学研究对象深入到原子核的结构中。核化学研究的对象所具有的特点，主要有：深层次，放射性，高能量，元素转变，静质量不守恒等。这些特点中，最关键的是深层次。核反应发生在原子核内部。

核电荷的改变对电子层的影响　任何一个原子都是原子核和电子的对立统一体。在核与电子的关系中，核是矛盾的主要方面，起着决定性作用。当核反应过程有新核生成时，由于新核和旧核的电荷不同，必然引起核外电子重新排列而与新核相适应。电子层的这种变化，也必然以化学变化的形式反映出来。新核产生的结果，就是新元素生成。所以，由核电荷改变所产生的化学变化比传统化学变化更深刻。在核化学中，常常利用这种变化规律，达到分离反应产物的目的。如利用四氟化钍经过中子照射而制备铀233同位素时，可利用ThF_4和UF_6具有不同的挥发性，而实现其分离。

放射性对电子层的影响　核反应过程总是伴随着有放射性射线产生。由于核处在原子的深处，所以当射线放出时，必然会通过电子层而与电子发生能量转化作用，导致发射内转换电子，从而引起化学变化。

高能量对电子的影响　核具有比化学结合能高百万倍的结合能，处于激发态的核，有可能把能量传给核外电子而变成基态，而电子的激发又会使原子变成电离状态；在核反应时，还有的核因反冲动能比化学键能高几百倍，很容易直接使化学键断裂而引起化学状态改变。

电子运动对核运动的影响　核化学界过去曾长期存在着一种观点，认为化学键结合能小得不能与核结合能相比拟，电子运动对核运动不可能产生明显而有价值的影响；现代核化学的发现和发展（如穆斯堡尔效应），否定了这种观点。发现核外电子（尤其最接近核的K层电子）对核运动有一定的影响。这种影响的本质，就是电子运动产生的电磁场对核运动的作用。虽然这种作用，还不足以达到产生核反应的程度，但不论在理论上，还是在实际应用中，均具有重要的意义。如相对论预言的引力频移，就是用穆斯堡尔效应证实的。

研究核与电子关系的认识论意义　恩格斯指出："自然科学只有在物体的相互关系中，在物体的运动中观察物体，才能认识物体。"[①]研究核与电子之间的相互关系，具有十分重要的认识论意义，不仅有利于认清核化学与传统化学的各自特点，分清它们之间的区别，而且有利于学科之间的相互促进或边缘学科的发展。核化学的研究工作，促进了高能化学领域的出现和发展。如热原子化学、辐射化学等新学科，都是核反应过程与化学反应过程相互关系的体现。运用穆斯堡尔效应拟定的测量分析方法，可用于研究原子核所在处周围电磁场变化的情况。因这种研究方法具有极高的分辨率，现已广泛用于原子核物理、固体物理、化学、医学和许多技术部门中。

（2）核化学的研究方法

研究方法的特点与研究对象的特点密切相关。核化学既研究核反应过程本身，又研究核反应过程与核外电子运动的关系。在制订核化学的研究方法时，首先应从原子的整

---

① 《马克思恩格斯选集》第4卷，人民出版社，1976年，407页。

体性和核反应的全过程，综合地考虑物理过程与化学过程的关系，静态与动态的关系，不仅利用核反应的特点，制订有效的实验方法，而且要把实验方法、理论方法和思维方法辩证地结合起来。

核反应的最终产物，总是以某种化学元素的形态表现出来。只要用核化学方法鉴定出核反应的最终产物的元素（和同位素）组成，就可推出发生了什么样的核反应。这就是通过认识静态性质而达到认识动态过程的研究方法，通过测定子体而判定其母体的存在。如用质子加速器轰击镍靶之后，经化学分离和能谱鉴定，确证有放射性铜-58生成，就可推断出发生了$_{28}Ni^{58}$（p，n）$_{29}Cu^{58}$核反应。

实验方法　由于核化学的研究对象具有放射性、不稳定性、超微量等特点，所以，核化学的实验方法也有着相应的特点。

主要由三种方法所组成，一是产生核反应的方法；二是化学处理（分离、提纯）方法；三是放射性的探测鉴定方法。

实现核反应是核化学进行实验研究的第一步。用天然放射源实现核反应，由于轰击粒子的能量和束流强度都受到极大的限制，所以，能实现的核反应不多。而利用加速器、反应堆等人工方法，已能实现上万种核反应。各种类型加速器和反应堆的现代发展，如高能加速器、多电荷粒子加速器，为核化学的研究工作，提供了强有力的手段。加速器在其发展过程中的每次飞跃（即原理和技术的突破），都把核化学的研究推向了新的阶段。

放射性元素都属于不稳定的元素，寿命有限，当分析鉴定它们时，必须考虑时间因素的影响，尤其对那些寿命短于一小时，甚至只有几秒钟的放射性元素，时间性更强；而且核反应过程复杂，生成的产物含有的元素和同位素种类繁多，在进行放射性探测鉴定之前，必须先进行化学分离和纯化。为此，在核化学中发展了许多快速而有效的分离分析方法。

核化学的实验方法，不仅具有核物理法与化学法相结合的特点，而且放射性为人们提供了新的测试手段，具有极高的灵敏性，其优越性大大超过了其他的分析测定方法。放射性能谱鉴定方法，能测出量的低限，已达到最高标准，目前，有一个放射性原子也能被测出来。这种方法，除了灵敏度高外，还能用于研究化学反应的机理和动态过程。

理论方法　现代化学元素周期系理论，在核化学的一个新领域——超重元素的发现中，显示出了一定的指导作用。如发现104号和105号元素的工作，就是根据它们分别类似于铪（Hf）和钽（Ta）设计实验而获得成功的。

目前用量子力学方法，已推论出超重元素的原子内的电子充填6d层，从113号元素开始充填7p层，甚至还推论出第八、第九周期的排列顺序。可是，原子序数大于113号元素的情况非常错综复杂。一方面，5g态电子处在壳层中的深处，成键的可能性变小；另一方面，由于出现了相对论效应，使电子轨道发生收缩，出现“错位”现象，引起了电子排列混乱。当应用狄拉克相对论量子力学方程计算方法预测电子层随核电荷增加而出现稳定性的界限时，必须考虑上述复杂因素，进行相应的修正。

核性质随着核子数增加而呈周期变化的思想，是根据一部分实验事实而从化学元素周期律的启发中延伸出来的。尽管这一点说明了化学元素周期系理论对核化学研究的指导作用，但两者不能相提并论，不完全对应，各有自己的特殊规律性。在解释超重元素

的核性质时，主要采用了核结构的壳层模型理论。这个理论是在“幻数”的基础上形成的，对研究超重元素有一定的指导意义。但是，“幻数”不是决定核稳定性的唯一因素，因为核内中子与质子的比值，核的对称性等，也是不可忽视的因素。“幻数”是一个复合概念。为了认清幻数结构对核稳定性产生影响的本质和规律性，还应对幻数这个概念进行分解，分析在这个概念的范围内影响核稳定性的各个方面，确立其基本要素，找出它们之间的单值关系，然后再综合分析。

原子是个相当复杂的体系，不只存在于局部之间，还存在着局部与整体之间的相互作用。目前的数学理论对处理这种复杂的多体问题，也有很大的局限性。所以，要建立起符合超重元素实际情况的核理论，还得不断发展和完善数学理论。

思维方法　　核化学的发展不仅需要理论指导和现代化的实验方法，而且也离不开科学的思维方法。核化学所采用的逻辑思维方法，在新元素的研究中表现得比较突出，其作用比较显著。

当发现新元素的工作开始进入超铀元素区域时，曾采用归纳法，只根据镎（Np）和钚（Pu）与铀的某些相似性，就把它们归成了铀系。这一错误假说，曾导致发现95号和96号元素的实验失败了。而西博格总结了失败的教训，通过正反两方面的分析比较，综合地分析了它们各种性质的同一性和差别性，正确地预测到了锕系的存在。

分析和综合的辩证思维方法，在核结构模型和超重元素的研究中，有着重要的作用。早在核化学产生和形成的初期，人们就开始注意核结构模型的研究，重视核结构理论的建立对研究核反应性能的指导作用。本世纪三十年代，在查德威克发现中子之后不久，就提出了核的质子—中子模型，随后又提出了液滴模型，较好地解释了低能核反应过程和处于激发态核的一些性质（如裂变、结合能等）。到了四十年代末期，玛·迈耶尔根据新的实验事实，提出了核结构的壳层模型理论，较好地解释了处于非激发态和弱激发态核的一些性质，如核的稳定性及其变化的周期性。与此同时，还有人提出了核结构的光学模型，等等。

上述这些模型，虽然都能解释一部分事实，但各有其片面性和局限性。到了五十年代，尽管液滴模型经过改进，发展成集体模型；壳层模型经改进，发展成核大变型的壳层模型，仍不能圆满地解释核的所有性质。如研究合成超重元素的核反应机理，会涉及到许多变量和参数，有的要测出三十多个参数值。对这些实验数据和因素，必须进行全面的分析，进而实现辩证的综合，从而从整体上把握超重元素核反应的规律性。目前对核模型正在酝酿着新的综合，为此必须对过去已有的液滴模型、复合模型、壳层模型、光学模型、集体模型以及统计模型等，进行综合分析，全面地辩证地考虑各种因素的影响，取长补短，综合其合理因素，发展综合性模型理论，从而提高核结构模型理论的预测性，指导实践，以达到对核力和核结构的正确认识。

核化学的地位和作用

核化学研究的主要对象，属于核层次。这是自然界的层次结构中，一个极为重要的层次。这个层次既是原子结构的主体，又是基本粒子的综合体。化学在从宏观层次深入到微观层次的认识过程中，有关这个层次的知识，对解释化学的本质也具有决定性意义。目前，核化学已形成独立的理论体系，在整个科学技术理论体系中占基础学科的地

位。

核化学的地位和作用是联系在一起的。地位决定着作用，而作用又反映着它的地位。核化学的作用主要表现在下列诸方面。

（1）核化学知识是原子能化学的科学基础。

凡是与原子能科学技术有关的化学问题，都属于原子能化学的研究范围。其中主要有放射化学、辐射化学、热原子化学、核燃料化学、同位素化学、超铀元素化学等学科。所有这些学科无一不是与核反应、核转变和放射性密切联系在一起。可以说，没有核化学成就，便没有现代的原子能化学。

核化学的发展成就，还使化学形成了一个高能化学领域。这个领域除了包括着前面提到过的辐射化学、热原子化学外，还包括着等离子体化学、光化学、激光化学等学科。

（2）核化学对无机化学发展的影响也很大。

众所周知，化学元素周期律既是无机化学的理论基础，也是整个化学的理论基础。没有现代的元素周期系理论，就不会有现代的无机化学。门捷列夫在上世纪六十年代发现的周期律，是一条经验定律，只知其然，不知其所以然。虽然用它能说明元素系统化的问题，但也存在着不少的矛盾。核化学对周期系理论的发展和完善起着决定性的作用。主要表现在：第一，人工制备化学元素，为周期表填补了空白。现已发现的109个元素，其中有四分之一左右，在自然界中是不存在的（即使有的存在，但其量甚微，难于发现和提取），完全靠人工合成，而且它们都是不稳定的放射性元素。这些元素的合成，以及对其性质的研究和鉴定，都是靠核化学方法实现的。第二，核化学发现的新事实和引入的新概念，对无机化学的理论发展起着很重要的作用。如无机化学对元素的原子量值为什么是小数而不是整数的问题，一直解释不了。只有在核化学研究中发现了“同位素”现象，并引入了这一概念之后，才使问题一清二楚了。第三，从锕系元素的合成到超重元素的合成及其理论发展，既是核化学发展的新方向和新领域，又是无机化学的新方向和新领域。第四，核化学的发展成就及其理论（如原子结构的有核模型理论），正确地阐述了核与核外电子的辩证关系，确立了核电荷和壳层电子对化学性质的决定作用，为元素周期律奠定了科学的理论基础。

（3）核化学的研究成果，促进了能源科学技术的发展。

铀核的裂变反应是由核化学家发现的，只有这一发现，才使原子能的实际利用有了现实可能性。各种核反应堆的建立和核燃料的制备、处理都离不开核化学工作。所以，核化学的发现和成就，不仅为解决长期能源问题，开辟了一条很有希望的途径，而且也为能源科学技术的现代化，奠定了科学基础。

核能的利用，对信息科学技术和空间科学技术的发展，也有重要作用。如人造卫星中用的电能源，微型核反应堆和核燃料电池都是可取的方案。比起化学电源来，这种电源具有功率大、寿命长、稳定等优点。

核辐射化学的研究，对材料科学和技术的发展，也有特殊的作用。如采用辐射聚合，辐照改性等手段，都能提供具有特殊性能的材料。

此外，核化学的成就，还促进了放射性同位素的生产和应用。也为解释化学元素起源、天体起源、宇宙射线的来源以及地球的热量平衡等重大问题，提供了实验事实和理

论根据。

核化学与核物理学的关系

核化学和核物理学是核科学技术的两门基础学科，两者在发展过程中，相辅相成，关系极为密切。这种关系从核科学刚开始酝酿诞生时，就明显地表现出来。居里夫妇发现放射性元素镭、钋的成就，就是核化学家和核物理学家结合的结果；卢瑟福由于从镭制剂中发现了氡而提出了蜕变理论，在1908年获得的诺贝尔化学奖；居里夫妇的传统传给了女儿和女婿约里奥-居里夫妇，他们发现了人工放射性并制造了人工元素，在1935年获得了诺贝尔化学奖。这些事例不仅说明了核化学与核物理学的密切关系，而且说明了核化学家和核物理学家相互协作的重要意义。还说明了有的核科学家具有双重职能，既是核化学家又是核物理学家，如玛丽·居里、伊伦-居里等。从核科学家获取诺贝尔奖的情况看，核物理学成就和核化学成就获奖的次数，几乎一样多。

核化学和核物理学的密切关系，还在于它们研究同一客体，研究的内容有一致之处，即都研究核的结构、性质、反应及其变化规律。正因为核化学和核物理学有着相同的研究对象，所以，它们研究的物质运动形态，必然受着同一根本矛盾的支配。这就是原子核中的排斥和吸引的矛盾运动。

尽管核反应的类型很多，但归纳起来就是两种，即裂变和聚变。原子核是吸引力和排斥力的对立统一体。核子之间的引力主要是核力，这是一种比库仑力强许多倍的短程作用力，仅限于相接触的核子之间；核子之间的斥力，主要是质子正电荷之间的库仑斥力，以及旋转离心力和核整体的不对称性所产生的斥力。库仑斥力是远距离作用力，有叠加作用，即一个质子可同时受到多个质子正电荷斥力的作用。这种作用力随着核电荷数的增加而增大。当原子核受到外来粒子的轰击时，原子核因受激其排斥力增大，如果这种排斥力大于核子之间的吸引力时，那么核就会破裂而重新组合。但是，因每个核都有库仑势垒，所以，轰击粒子必须具有一定的能量才能引起核反应。

在高能核反应过程中，能同时发生多种核反应，相互排斥竞争。其中主要形式就是合成和破坏的竞争。

虽然核化学不只研究核内的排斥与吸引的矛盾运动，而且也研究核与电子的排斥与吸引的矛盾运动，但由于它与核物理有着本质的一致性，所以，核物理甚至原子物理的原理和方法都可引用到核化学中，以提高核化学的科学性。如核结构理论，相对论、量子力学等，都对核化学的研究工作有一定的指导作用。

核化学与核物理学的不同处，就在于它们研究的出发点和方法不同，因而所起的作用也不同。核物理学的研究着眼于核力的本质和核内部过程，而核化学的研究重点在于核过程与核外电子的关系和化学元素的转变。核物理学采用的研究方法，主要是云雾室、气泡室、核乳胶等仪器设备，以便直接探测记录核反应过程；而核化学采用的研究方法，是先把加速器和反应堆照射的靶子进行化学处理、分离和纯化，将核反应产物以化学元素状态分离出来，而后再进行放射性测量鉴定。

核化学和核物理学都是从不同的侧面研究核客体及其变化规律的，各有其特殊的作用，不能相互代替。就从研究核结构与核反应性能的关系看，不完全是核物理学的任务和课题，而核化学关于这个课题的研究，也起着特有的作用。核化学虽然采用间接方法研

究核结构和性质，但由于这种方法能与化学元素联系在一起，在说明核反应过程中可弥补核物理学的不足。

核化学和核物理学都是以1919年卢瑟福实现第一个人工核反应为标志而同时诞生。在发展中，两者密切配合。今后在超重元素、基本粒子的研究领域中，以及在核能的实际利用中，两者更需要密切合作，并驾齐驱。

张 道 民

5. 化学振荡与耗散的哲学

比利时布鲁塞尔学派的领导人，著名科学家普利高津教授，在1969年提出了耗散结构理论，这一理论很快受到各门科学的重视，普利高津也因此荣获了1977年诺贝尔化学奖。耗散结构理论在化学和其他自然科学上都有重大的理论意义和实际价值，同时，也向我们提出了许多值得从哲学上思考的问题。

化学振荡反应和耗散结构理论有着十分密切的关系。近年来，许多化学家都十分重视化学振荡的研究，并取得了十分有意义的成果。

化学振荡与耗散是现代化学中的重大课题。下面，我们就对这一课题进行一些初步的探讨。

化学振荡研究的历史和现状

近二十年来，人们已经发现了许多化学振荡反应，有人统计说有四十种，其中，最著名的有十二种。

人们对振荡并不陌生，钟摆按着固定周期振荡，自动交通灯有节奏地红绿交替，生物按着一定的节律变化等等。但是，化学上的振荡比物理学和生物学上的振荡要发现得晚得多。近十几年才引起人们的广泛注意。

化学反应的振荡现象在十九世纪的后半叶才发现。1873年，李普曼就曾做过一个"汞心脏"实验。他把汞放在玻璃杯的中央，再把重铬酸钾和硫酸的混合溶液注入杯中，然后再把一个铁钉放在紧靠汞附近的溶液中。这时，他十分惊奇的发现，汞珠立即就像动物心脏似的跳动了起来。他认为，这是由于化学反应使汞的体积周期性的变化造成的。

1903年，布雷迪格和文迈尔又重做"汞心脏"的实验，取得了成功。此后，他们又让过氧化氢和放在烧杯中的汞球发生作用，发现了一种新的"汞心脏"。这种"汞心脏"是由于汞球表面的氧化膜周期性地形成和瓦解造成的。

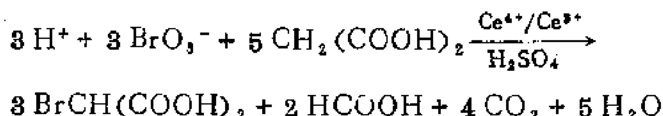
在十九世纪末，瑞利发现，含磷物质在气相氧化时，产生周期性的冷光，他把磷放在一个长玻璃管的一端，从另一端通入氧气，从而发生了周期性的闪光，一闪一闪地进行振荡。后来，化学上又发现，把铬和盐酸反应，置换氢气，氢气的发生速度是不连续的，而是周期性的变化。经过进一步研究发现：铝和碳酸钾溶液反应、钠汞齐和水反应、锌和盐酸反应，在产生氢气时，都是周期性地进行的，这类反应都是化学振荡反应。

1921年，布雷在做过氧化氢被碘化物和碘酸耦联催化分解反应时，又发现了周期性

现象。这种化学振荡反应，是均相振荡反应。

1959年，贝洛索夫和扎布金斯基又发现了均相溶液的化学振荡反应：

丙二酸在催化剂铈（Ce^{4+}/Ce^{3+}氧化还原耦，以硫酸盐的形式加入溶液中）作用下，被溴酸氧化，在外加物的一定浓度范围内，出现了体系的浓度随时间周期改变的化学振荡，体系的颜色一会变红，一会变蓝，周期为30秒，可以持续50分钟之久。这个化学振荡是一种时间有序结构，其反应方程式如下：



$$3H^+ + 3BrO_3^- + 5CH_2(COOH)_2 \xrightarrow[H_2SO_4]{Ce^{4+}/Ce^{3+}}$$

$$3BrCH(COOH)_2 + 2HCOOH + 4CO_2 + 5H_2O$$

用电位滴定法对上述反应进行浓度测量的结果如下：

$[CH_2(COOH)_2] = 0.032M$

$[KBrO_3] = 0.063M$

$[Ce(NH_4)_2(NO_3)_5] = 0.01M$

$[H_2SO_4] = 0.8M$

$[KBr] = 1.5\times10^{-5}M$

温度$T = 25℃$

在上述反应中，如果把反应物一次加入体系中，使反应进行，一般只能维持50分钟左右的“寿命”。但是，如果我们设想这个体系能进行耗散，即不断地加入反应物，同时又不断地取走产物，那末体系就会长期维持红—蓝振荡的时间结构，呈现出有规律的节奏和美丽的花纹。

到现在为止，化学上发现的最著名的化学振荡反应还有：布雷—利伯哈夫斯基反应，布里格斯—劳舍尔反应等等。

人们的认识并没有停留在对化学振荡反应的表面观测上，而是进一步研究其反应机理，努力创立其反应的数学模型。

1910年，洛特卡提出了一个以质量作用定律为基础的振荡反应数学模型，它还包括了自催化的步骤。1920年，他又进一步修正了该模型。1931年，沃尔特拉在洛特卡模型的基础上，又提出一个更完善的模型，此后，洛特卡—沃尔特拉模型就逐步为化学界所接受。1955年以后，普利高津又提出了一个非线性二次三分子自催化模型，并指出：“只要不可逆的化学反应是在远离平衡态下进行，就有可能出现有序结构，方程也就可能存在着振荡解。”总起来看，化学振荡就是化学反应中在一定条件下，形成的时间有周期空间有结构的现象，这种现象只能在化学耗散过程中出现。

化学耗散

普利高津在对物理学、化学、生物学的系统研究的基础上，在《结构、耗散和生命》的论文中，提出了耗散结构的基础理论，他认为：一个开放体系（不管是力学的、物理的、化学的，还是生物的系统），在达到远离平衡态的非线性区域时，一旦体系的某个参量达到一定的阈值通过涨落，体系便可以发生突变，即非平衡相变，这样，就会由原来无序的混沌状态，变成时间、空间或功能有序的新状态。

根据耗散结构理论，体系从无序向有序转化可以初步归结为以下四点：

（1）体系必须是开放的。只有开放体系才能和外界进行物质、能量和信息的交流，从而使体系从外部输入的负熵流大于或等于体系内部的熵产生，这样才能维持整个耗散体系的“生存”。如果体系是孤立的封闭体系，由于熵不可逆地增加，最后就会使体系达成热平衡状态，从而使化学反应停止下来。应当着重指出：这个体系必须能从外界引进负熵，而不是正熵，正熵只能加速体系的“死亡”。

（2）体系应当处于远离平衡态。孤立体系最后达到的不随时间变化的状态称为热力学平衡态。孤立体系最后达到平衡态之后，不仅与外界丝毫没有物质、能量、信息的交换，而且内部的宏观状态也不会有任何变化，体系就不会再发展了，也就没有历史了。所以说耗散结构在平衡态或近平衡态都不能形成，只有在远离平衡态才能形成。

（3）形成耗散系统的体系内部各要素之间的相互作用关系应当是非线性的。非线性的复杂体系，就不象机械力学决定论所描述的那样简单的线性关系，因而其发展方向也不是唯一的，而是由许多因素决定的，因此会有几种可能方向，几个分枝。

（4）一种状态向另一种状态变化时，涨落起着关键的作用。例如在化学耗散体系中，光照、加热、催化、诱发等等，都会使体系出现涨落，进而导致体系的变化。例如：过冷液体，往往一个微小的振荡就会使它结晶；过饱和溶液给予一个微小的扰动，往往会使晶体析出。甲烷和氯气混合，受到光照就会迅速发生链式反应，某些反应加入一点催化剂，往往会迅速完成……。

用耗散结构的理论分析和考察表明，化学反应体系都是耗散体系，因为，它们都要从外界引进物质、能量、信息，还都要向环境排放物质、能量、信息；体系在反应进行的过程中，都处于非平衡态，达成平衡反应就会中止；化学反应体系都是由复杂因素组成的非线性关系；每种化学反应历程都要由涨落或起伏开始。

我们把发生化学变化的耗散系统称为化学耗散，化学耗散在化学上有极大的普遍性，从实验室中的试管、烧杯，到化工厂中的反应釜、反应罐、流水生产管道，都毫无例外地要进行耗散。化学反应体系中，只耗不散则滞，只散不耗则竭。耗和散是化工生产中一个问题的两个方面，二者互相依存，互为前提，互相统一构成了化学化工生产中的一对矛盾。

实际上，所有的反应体系都可以看成一个耗散结构。因为任何反应体系，都要加入反应物而取走产物。加入反应物对体系而言，是一个消耗环境中的物质的过程，即“耗”的过程；而取走产物，对体系而言，则是把物质发散到环境中去的过程，即“散”的过程。此外，反应体系还要和环境进行能量和信息的交流，这种交流也是耗散的过程。

化学进化和化学退化

自然界的化学图景是进化的还是退化的？克劳胥斯和达尔文谁是谁非？一个多世纪以来，科学家和哲学家们都在思考这个问题。一百多年前，恩格斯批评了热寂说，他指出：“放射到太空中去的热一定有可能通过某种途径（指明这一途径，将是以后自然科学的课题）转变为另一种形式，在这种形式中，它能够重新集结和活动起来。因此，阻碍已死的太阳重新转化为炽热的星云的主要困难便消失了。”① 化学耗散的思想为解决

① 恩格斯：《自然辩证法·导言》，人民出版社，1971年，23页。

这个问题提供了理论根据。

首先，现代化学有了充分的材料，描述自然界的进化图景。在几百亿年前，弥散在宇宙间的“原始星云”，主要成分是十分简单的氢。由于吸引和排斥的矛盾运动。促使星云转化成星胚。由于引力收缩，逐步形成恒星，并使恒星内部的温度升高到7×10^6K，这时简单的氢就会聚变成复杂的氦，这叫做“氢燃烧”阶段。这时，氢聚变核反应造成的辐射膨胀和恒星的引力收缩达成动态平衡。当氢聚变的核反应终止以后，这时恒星的引力收缩又占了优势，引力收缩使恒星内部的温度再一次上升，当温度升高到1×10^8K时，就发生了氦聚变成碳、氧的核反应。这时，恒星的引力收缩与核反应造成的辐射膨胀又一次达成新的动态平衡。当氦大部分烧完以后，氦聚变的核反应也就终止了。这时恒星的引力收缩又占了优势，从而使恒星的中心温度再一次上升，当温度升高到1×10^9K时，就发生“碳、氧燃烧”聚变而生成镁、硅、硫等重的核。可见，恒星的中心区形成一个生成新元素的大火炉，在这个火炉中，元素由简单到复杂的产生，呈现出进化的趋势。“大爆炸宇宙论”虽然和宇宙的星云起源说出发点不同，但这个理论也得出了由简单粒子到复杂元素的进化链条。

化学进化，不仅表现在化学元素由简单到复杂的进化，而且还表现为原子形成分子，简单分子形成复杂分子的进化。近年来，四十余种星际分子的发现证明，在宇宙中，在自然条件下，通过化学进化。原子可以自动地结合成分子甚至高分子。1953年米勒的著名实验和福克斯的实验都证明：在原始地球的条件下，通过化学进化，可以自动生成氨基酸和类蛋白质，其分子量甚至能达到3000—20000。这说明，化学进化是自然界中的固有趋势。化学进化再向前发展，就出现了生物进化。化学进化是生物进化的基础和前提，达尔文的进化论有着深刻的化学原因。

现代化学的发展证明，自然界中不仅有化学进化的倾向，同时也存在着化学退化的倾向。化学元素在周期表中的位置表明：α衰变和正β衰变，都会使复杂元素按着位移定律转变成简单元素。这就是一种退化的阶序。现代超铀元素化学证明，人类不可能无限制地合成复杂新元素。美国著名化学家R．霍夫曼在1980年美国化学学会上指出：人工合成复杂超铀元素存在着“稳定性界线”。这证明，人类合成新元素不可能向着无限复杂化的方向，无限制地前进。当核的质量达到一定阈值以后，就会迅速崩散而退化成简单元素，甚至基本粒子。事实上，我们只要想一想，苏联合成107号元素的寿命，只有2/1000秒，1983年西德合成的109号元素寿命只有1/5000秒，这个问题就不言而喻了。

化学退化的趋势说明，克劳胥斯的热力学第二定律，具有极大的普遍性，即自然界中确实存在着由有序到无序，由复杂到简单的退化倾向。

化学进化和化学退化是自然界中的矛盾现象，反映在化学理论上，就出现了进化和退化的“悖论”。事实上，设想单纯的直线进化，设想世界不变地趋向无限制的复杂化，设想事物总是由简单到复杂由低级到高级前进，最后，那就一定会产生一个全知全能的“上帝”，这个“上帝”达到无所不有，无所不能，无限复杂，特别“高级”！反过来，设想世界会单纯地无限制地退化，设想世界会不变地趋于无序或混沌，最后，也同样需要一个上帝去“上紧宇宙之钟的发条”。真正的辩证法，决不会因为人们一个世纪以来对“热寂说”的批判，就会去迷信那条无限复杂化的进化螺旋，而应当把进化和退化

统一起来加以思考。

化学耗散的理论，统一了化学进化和化学退化的矛盾，统一了有序和无序的矛盾，耗散结构理论认为：处于远离平衡态的开放体系，通过从外界引进负熵流，而抵消体系内部的熵产生，在一定条件下，通过涨落而形成新的有序结构。宇宙中，一方面复杂物质会转变成简单物质乃至基本粒子，另一方面简单物质又会自然生成复杂物质，直至氨基酸和蛋白质。也就是说，化学退化中包括着化学进化，反之亦然。自然界中，时刻都有从高级的化学秩序向低级的化学秩序的退化，也有从低级化学秩序向高级化学秩序的发展。

化学平衡和化学非平衡

化学耗散理论还揭示出化学平衡和化学非平衡的矛盾及其辩证转化，展现出非平衡化学的广阔前景。

传统的化学理论，以研究化学平衡作为自己的宗旨，如，溶解平衡、电离平衡、水解平衡、化学反应平衡、络合物平衡等等。奥斯特瓦尔德因创立化学平衡理论而获得1919年度诺贝尔化学奖。勒沙特利因创立化学平衡原理而名垂青史。在化学平衡原理的指导下，化学家们将近进行了一个世纪的化学理论研究和实验探索，取得了巨大的成功。但是，这也给人们带来了一种错觉：化学平衡比化学非平衡有用。

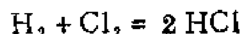
其实并不然，这完全是由于认识上的直线性给人们带来的误解。如果我们把所有的化学反应考察一番，我们就会立即发现，化学反应之所以发生，都是由非平衡引起的，正是由于非平衡才使物质由一种化学形态变为另一种化学形态，从这个意义上，我们可以说：非平衡是化学变化之源，相对平衡则是变化的结果。

苏联著名化学家谢苗诺夫，经长期研究化学反应历程，提出了著名的分枝链式反应机理。这一反应机理，和耗散结构的理论联系起来对照比较，我们可以把分枝链式化学反应的反应物、反应历程、产物和平衡、非平衡的关系用下式表示出来：

反应物——反应历程——产物

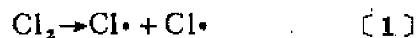
平衡——非平衡　——平衡

这说明，谢苗诺夫的链式反应历程，证明了化学耗散理论所揭示的化学平衡和化学非平衡的矛盾及其辩证转化。以氢和氯在气相反应生成氯化氢为例：

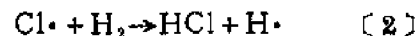


$$H_2 + Cl_2 = 2HCl$$

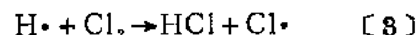
这个反应的始态（H_2和Cl_2）本来处于平衡态。经过反应，生成氯化氢以后，又进入到另一种平衡态。那末，起始的平衡态如何转化为终了的平衡态呢？这就要靠非平衡来实现：



$$Cl_2 \rightarrow Cl\cdot + Cl\cdot \quad [1]$$



$$Cl\cdot + H_2 \rightarrow HCl + H\cdot \quad [2]$$



$$H\cdot + Cl_2 \rightarrow HCl + Cl\cdot \quad [3]$$

……

以上是一个游离基反应历程。反应物的个别分子，一旦处于远离平衡态，遇到一个涨落或起伏，就会产生游离基。游离基一旦产生，又会进一步产生新的游离基。这样迅速地演进下去，一直到反应结束。

现代化学，已经由只研究相对平衡的始态和末态，进入到研究反应历程的非平衡态。因此，非平衡态化学的建立，是化学一个必然发展趋势，一个新的化学分支——非平衡化学正在形成中。在一定范围内讲，化学非平衡比化学平衡更有积极意义。所以普利高津认为："非平衡是有序之源。"

化学耗散和化学系统工程

化学耗散的基本思想，不仅对非平衡化学的研究有重大的指导意义，同时，它的在流动中实现有序的思想，对化学系统工程也有重大的指导意义。

化学系统工程，亦称联合化学反应工程。化学系统工程要求人们打破部门和行业的界线，把各方面的力量组织起来，协同而有序地解决大的化学工程问题，从设计、实验、施工到投产，以及投产以后的管理都算在内。1983年10月，我国成立了第一个联合化学反应工程研究所。

化学系统工程是化学工程科学的一个新兴领域，它对于研究和开发化工、炼油、能源、轻纺等行业都十分重要。化学系统工程可把各有关部门联合成一个协同的网络状整体，发挥效率，增加优势，扩大生产。我国著名化学家侯德榜对永利碱厂的设计、施工、投产和管理的过程，可称为一个杰出的化学系统工程。我国正在建设中的金山石化总厂，天津大港石油化工联合企业，也都是著名的化学系统工程。

化学耗散的思想用于研究化学系统工程，要求人们掌握一个"流"字，要求在流动中实现有序、高效、最优化。这主要应做到以下三个方面的流动：

（1）人员的合理流动。人员的流动，就形成"人流"，即人员的耗散。这样，可以在流动中提高参加系统工程的人的质量。其基本要求是让最合适的人，在最合适的时机，干最合适的工作。把那些有知识，懂技术，会管理，经验丰富，热情积极而又富于献身精神的人组织到系统工程中去。在化学系统工程中，人的组织系统不是不变的，而是不断流动的活的系统。目的在于：第一，不断以优秀分子代替相形见绌的分子。第二，在化学系统工程的不同进展阶段，以急需人才更换那些完成了使命的人才。第三，某些人员在某些阶段离开了化学系统工程，但在以后的系统工程中又需要他们时，还应回到系统工程中去。总之，化学系统工程中的人才结构，是一个活的有"耗"有"散"的结构，时刻都要吸收有用人才，排除不需要的人员。而不是一个不变的"死结构"，"死结构"只能贻误化学系统工程的有序高效进行。

（2）物的流动。在化学系统工程中，物也要进行合理的耗散，做到原料不积压，产品不积压、厂房设备不闲置。耗散结构理论认为，材料产品的积压是一个极大的浪费。因此，材料要用多少进多少，进来的马上就用上，周转时间要做到最短。工具、设施、厂房要有最大的使用率和运转率。闲置的设备，只能占用资金，而不能创造价值。化学系统工程中，产品也要迅速地销售，随产随销、快产快销，迅速周转，增加利润。

同时，化学耗散理论对化学系统工程的领导和管理机关也提出了要求，要求这些机构要有足够的信息量，信息流通越快越好，这样才能做出有效的反馈和正确的决策，组织机构要协同、灵敏、整体化，管理人员、各级领导要进行新陈代谢。

总之，化学耗散与化学系统工程有着十分密切的联系，在处理化学化工的研究和生产问题时，得出了相同的结论，化学研究和化工生产的各种要素，都应互相协同，形成

一个有耗有散的活生生的体系，这个体系要在运动和代谢中完成它的使命。

王 德 胜

6.生命化学中的哲学问题

生物学是当前科学发展的前沿，向生物学的渗透正是现代化学发展的前沿之一，有必要对这方面提出的哲学问题展开讨论。问题的核心是，化学家在从他们研究的传统领域到研究生物大分子进而向生命体乃至大脑与意识这一发展过程中，由于对象的变化，化学家的实验手段，概念体系以至思想方法与认识方式都必须随之发生变化，这样才能适应新的研究。具体来说，化学家在作有关生物的化学实验时，应从整体的观点出发把离体研究与体内研究结合起来；在研究、合成生物大分子，探讨生命的起源时，要进一步贯彻系统的观点，以及发展的历史的观点。此外，在化学向生物学的渗透中，仿生化学的作用越来越重要，因而也有必要讨论它的方法论意义。因此在讨论中，也会涉及生物体的特性及生物学研究的一些方法和哲学问题。

离体研究与体内研究的认识论问题

所谓离体研究，是指将体内的化学物质提取出来，或截取生命运动中的某化学过程在体外进行研究。体内研究则相反。在早期，化学家们涉及生命现象的实验属于体内的研究。例如普利斯特列、拉瓦锡等人对动物呼吸所作的实验，以及后来普利斯特列、英根豪茨与塞尼比尔等人表明光合作用即是氧化的逆反应的实验等。这些实验只涉及复杂生理过程的初始物质与终极产物，对于这些物质如何在体内变化和过程的细节则一无所知。或者只能将复杂的生理过程与简单的化学反应作类比，甚至将二者等同起来；或者认为复杂的生理过程只能在活的机体内进行，于是祈求活力论的解释。

随着生物学与化学的发展，就有可能将体内的物质分离出来，在离体的情况下进行实验，观察其变化。1817年佩利蒂卡分离出叶绿素。1857年贝尔纳试图查明糖原生成的机能，从肝脏中分离出糖原，这就奠定了碳水化合物新陈代谢研究的基础。毕希纳在1897年分离出有发酵能力的酵母精，这是生物化学在离体研究方面迈出的重要一步。本世纪二十年代，希尔的实验也打破了认为光合作用是一种只能在活细胞内进行的生命现象，使光合作用的研究可以在离体的叶绿体上进行。这是具有重要意义的，然而令人遗憾的是希尔本人在当时并未认识到这一点。1931年生理学诺贝尔奖获得者瓦尔堡，早期曾强调生物作为整体的重要性，但后来认识到若不去了解部分如何协同作用，只会助长当时那种认为新陈代谢依赖于有活力的组织的观点。瓦尔堡后来之所以在这方面作出贡献，艾伦认为就是因为他从自己的旧观念中解脱了出来，并认为新陈代谢看来可以在化学上独立于活细胞进行。

这些离体的研究大大丰富了人们有关的知识。研究开始深入到细胞内部，逐一检出各种在生命运动中起作用的化学物质，分别地研究复杂生命运动中的各个细节。这对于弄清生命的本质，彻底破除形形色色的活力论是十分必要的。然而随着研究的深入人们逐步发现，无论是各种化合物还是各个环节，它们都是彼此休戚相关，互相制约的，生命现象正是它们严格地协同作用的体现。玻尔在1932年的一次讲演中提请研究者们注

意，“为进行生物学和物理学研究所要控制的条件不是直接可比的。因为保持对象存活给前者加上了限制，而这在后者是没有的。这样，要是我们试图推进对动物器官的研究以能描述由单个原子所引起的活力的功能，我们无疑就是杀死了这个动物”。

一旦离体的研究进行到一定的程度，人们已经了解到许多物质各自的作用和过程，逐步发现它们之间的相互关系，这时就有可能在某些领域继续开展离体研究的同时开始进行体内的研究，在体内的实验中将以往零散的不系统的知识综合起来。生物化学家的注意力又重新移向细胞的结构，转向整体与各种生命现象的关系，这正是目前生物化学研究的一个主要趋势。离体的研究使人们摆脱了活力论，但却滑向还原论，现在是该用强调整体的思想代替还原论的时候了。

由体内到离体再到体内的研究经历了一条否定之否定的道路。在刚踏上——有时还是无意地——陌生的生命领域时，化学家所接触到的必然是生物整体所表现出来的外部特性。为了对独特的生命现象作出合理的解释而不致堕入活力论，而后进行的离体研究不仅是必要的而且也标志思想的解放，是对原始整体观念的否定。“整体观念”并不是在任何情况下都是褒义词。即使在生物科学高度发展的今天，只要其中尚有未弄清细节的领域，离体研究将有其永久的价值。

然而离体研究并不就是一切。若我们的认识停留在离体研究上，那么将看不到生命运动的特殊性而视之与物理、化学运动无异，从而导致还原论思潮。另一方面，即使在进行离体研究时认识到这种研究的局限，也还是存在矛盾。有人这样描述现代生物化学家的状况：“他们一方面如活力论者思维，主张机体并不就是复杂的机器，另一方面在实验室里他们又不得不如一名机械论者行事，科学研究的要求迫使他们以物理和化学的可测量的参数的术语来考察他们的实验”。认识的深入需要对方法本身进行改革。一旦条件许可，就应该在继续做离体研究的同时考虑活的机体，如玻尔所强调的维持生命存活状况下的研究。经历了否定之否定的认识过程，这时对整体的认识是建立在对其内部成分及相互作用认识的基础之上，因而也是对本质的认识。

由此看来，离体研究与体内的研究并非仅仅就是实验手段的问题，而是涉及方法论、认识论的带有根本意义的问题。化学家在进入生命领域时就应认识所研究课题的知识水平，根据具体情况进行离体、体内或兼容二者的研究。在后一情况下仿生化学中的模拟方法的应用或许是一条有效的途径。

化学仿生中的方法论问题

仿生科学是近年来发展很快的学科，属于生物科学与技术科学间的边缘学科，把各种系统所具有的功能原理和作用机理作为生物模型进行研究，希望在技术发展中能够利用这些原理和机理、以实现新的技术并设计出更好的仪器机械等。有人将仿生学对某一课题的研究分为三个阶段：首先根据生产技术提出的技术问题来研究生物系统某方面的结构或功能特性，然后从中抽出原理，建立数学模型，最后再应用于工程技术。模拟出来的东西还要在实践中改进，或者随着对生物原理认识的深入而使模拟趋于完善。仿生化学是仿生科学的一个分支，是化工与生物学的边缘学科，大致情况与研究途径也是如此，例如借用天然物质的结构或个别生化反应的机理或体内某条完整的合成路线。模拟固氮酶的研究也是随着对固氮酶认识的深入而发展。

显然在仿生科学中，包括化学仿生所强调的主要是应用，为此在生物体中寻求可学习或模仿的模型。塞半纳满怀信心地指出："这一领域的巨大优越性是，我们可以看到，在漫长的进化过程中，自然是怎样成功地解决问题的。因而我们确信，不管这些问题有多困难，它们也还是能解决的。"

然而仿生科学的目的还不应该仅止于此，尤其是化学仿生，因化学与生物学的特殊关系而应肩负重任。化学仿生不仅是为了解决化工生产包括十分重要的如合成氨等，还有获取新能源如分解水的问题，而且要由这一途径去探索揭示各种生命现象的奥秘。从理论的角度来看，后一点更为重要。1978年南京大学戴安邦教授提出要解决生物体内金属存在的状况以及如何发生作用问题的两条途径。一是研究生物体内含有金属的活性物质本身，但这些物质皆很复杂，不易进行研究。所以无机化学采取另一途径，就是利用较简单的化合物，对所要研究的作用加以模拟，以求对复杂物质作用的研究提供线索。戴先生称前一条途径为"无机生物化学"，而后者为"生物无机化学"，这实际上就是通过仿生的角度来加以研究。在这里，戴先生明确赋于化学仿生以研究生命的重任。从事基本理论研究的化学家都关注化学仿生的这一功能。

当化学仿生在这方面发挥作用时，其中的方法论、认识过程与强调其用于实际应用时有所不同。这时，真实的生命过程不再是用作学习的模型，而是科学研究的原型；而用以模拟的化合物、反应过程等成了模型，通过模型来研究原型。

自然，这种方法并不就是前述体内的研究，但它又与离体的研究有本质的区别。离体研究是提取出体内的某种物质，截取全过程的某一片段，使之与整体，与全过程分离开来。在对孤立分离的各个物质、片段了解的基础上经过综合而试图得到整体以及全过程的知识。我们在前面已经分析了这种方法的不足之处。化学仿生的模拟方法则可以模拟体内多种物质的协同作用，可以模拟过程的始终，这样就避免了陷入形而上学的危险以及尔后进行综合的困难。就这一点来说，化学仿生具有体内研究的优点。

其次，有些物质极其复杂，例如固氮酶，即使在体外进行研究，在目前尚难以弄清其结构与功能。有些过程也难以由体外研究搞清，而模拟方法在这里是大有作为的。在化学仿生中，模拟方法是以已知去研究未知，建立模型与原型间的比较关系。通过原型与模型间的比较发现二者之间的差距，从而改进模型，在此基础上再作研究，更多地获得关于原型的知识。另一方面，由于上述工作以及对生物的直接研究和其它方面的工作加深了对生命本质的理解，由此即可反过来改进模拟物即模型，然后又在改进了的模型的基础上作进一步研究，从而又增加关于原型的知识。这是一个互相促进的正反馈关系。在这一过程中，模型逐步接近原型，人们逐步达到对原型日臻完善的认识。这是化学仿生中模拟方法的又一优点。化学仿生中的模拟方法以其独到的优点应该进一步引起研究者的重视。

然而模拟方法并非是通往成功的唯一之路，它应与其它方法结合起来。尤其是最终我们还要落实到对原型即生物本身的认识。对生物本身的研究这一支正面攻坚的队伍，与通过模型来接近原型这一迂回前进的队伍应该结合起来。"问题的解决将在无机生物化学和生物无机化学两者研究的会合之日，而这日子的到来尚有待于两者的继续努力"。

研究化学进化的意义和方法

研究化学进化，即前生命起源，是化学向生物学渗透的主要趋势之一，并且已经引起各门学科越来越多科学家的兴趣。

研究化学进化的意义对生物学来说是显而易见的。杜布赞斯基在1973年表示，若不弄清进化，那么生物学中什么都是无意义的。然而化学进化研究的意义还不仅在于此。因为对前生命起源的研究是科学从研究存在到研究演化的潮流中的一部分，因而我们还要从更广的角度来看这一问题。

电子的发现揭开了二十世纪科学革命的序幕，物理学家在沿着量子阶梯继续深入的同时，不久便成功地建立了原子模型，二十年代末建立的量子化学又使人们对物质结构层次的认识上升到分子层次。科学家们接着便开始探索生物大分子的结构，并于五十年代初获得成功。近年来人们已经开始谈论建立染色体模型的必要性，以及向大脑与思维领域进军。自然科学在二十世纪后的主要倾向是逐一理解量子阶梯上越来越高层次的物质的存在方式。按宇宙大爆炸理论的解释，自然就是由低层次到高层次逐一演化发展而来。因而进入二十世纪后科学发展的这一倾向实际上是与自然的演化方向一致的。然而这种一致还不完全，科学不仅要说明原子、分子、生物大分子等各个物质层次的规律，而且要进一步阐明低层次的物质怎样历史地逐一演化生成高层次。不仅要说明宇宙演化的各个阶段，而且要说明怎样从一个阶段演化发展到另一个阶段。总之，科学不仅要揭示存在，解释存在，而且要解释演化。

“从存在到演化”是耗散结构理论提出者普利高津的名言，揭示了二十世纪后科学发展的一个趋势，即由二十世纪前科学注重于研究各种存在物到二十世纪后转向研究各种存在物之间的转化、关系以及来源、演化和趋势。科学家们是在这么做。近几十年来物理学与天文学逐步合流，探索天体、元素以至宇宙的起源和演化宇宙大爆炸理论，量子色动力学、量子味动力学揭示或正在揭示我们所认识的物质层次结构中一直演化到核的过程。量子力学即说明核与电子何以结合而形成原子，量子化学进一步阐明原子与原子形成分子的过程与机理。现在的量子生物学、分子生物学是试图在电子、原子与分子的水平上理解生命的本质。然而它们并没有向我们提供化学小分子如何形成生物大分子的历史过程。在非生命界和生物界之间的鸿沟里虽已填补了从尿素一直到胰岛素到核酸片断的各种物质，然而尚未从历史的角度，从演化的观点揭示二个层次之间的关系，揭示无生命与生命之间的关系。由于包括这一脱节在内的若干脱节，科学尚未形成一整体，成为一连续的链条。目前，生物学家、化学家、物理学家、天文学家、考古学家等正在协力锻造科学链条的这一环节，也只有这样，我们才能取得对生命本质的理解。这就是研究化学进化的意义所在。

关于化学进化的研究方法，首先，应该在远为深远宽广的时空中进行。

近年来天文学家发现越来越多的星际分子，其中有的相当复杂，并且证明这些分子在宇宙空间比在原始地球的条件下更容易生成。例如有人在1981年报道，在宇宙空间的一大片分子云中含有浓度比天文学家所预料的大一千倍的大量碳氢化合物。一门新兴学科——宇宙化学正在形成之中。所发现的星际物质足以充当化学进化的砖石，这使科学家们强烈地意识到，必须在地球起源、太阳系起源，以至宇宙起源的背景上开展对生命起

源的研究，要看到这几个起源之间的联系。有人已经提出种种假设，例如鲁滨逊在1966年假定，生命的胚芽早已存在于微星的云尘气体中，在约50亿年前凝聚而成地球等行星。有人认为生命是由陨星、宇宙粒子等途径由天外带到地球的，例如从南极冰层中取出的未受污染的陨石中发现左旋的氨基酸。还有人以为生命是史前来到地球的天外智慧生命带来的。固然，不论何种假设都不能就此停步，在将问题由地上推到空间后还是要问在空间条件下生命的起源。然而现在我们毕竟是站在整个宇宙演化的背景上来认识这一问题，这不能不说是科学的进步。

随着空间科学的发展，科学家对太阳系中的其他行星作了更细致的观察研究，这就有可能与原始地球作比较的研究。福克斯提出，“我们如果比较地球、月亮、陨星、行星与星际物质的碳化学”，这就形成所谓比较宇宙化学，而“长远地看，比较生物学与比较宇宙化学形成一进化的延续体”。福克斯在《分子进化与生命起源》一书的最后充满激情地写道：“外空间与人类精神是科学的两个绚丽的前沿，而后者正在开始去理解它是如何由前者产生的”。

研究生命起源更重要的无疑是要采用历史的方法，在研究中要贯彻历史的观点，这在前面分析研究生命起源的意义时已经很清楚了。福克斯强烈反对目前在生命起源研究中那种“重组”（reassemble）的方法，即通过拆卸现代生命体然后再装配起来。例如将烟草花叶病毒分为核酸与蛋白质，然后再将它们复原的实验。另外，合成核酸与蛋白质的大量工作实际上是在分析现代核酸与蛋白质的组成与结构的基础上进行的，这实际上也是重组。诚然，通过重组的研究方法，我们已经大大丰富了关于生命本质的知识，然而通过重组的研究并未告诉我们，在历史上自然界是怎样形成以及选择了核酸与蛋白质作为生命的最主要成分，遗传密码为什么是这样而不是别的什么方式，例如据说最近发现线粒体中的遗传密码不同，认为这说明密码在自然史上刚出现时一直到现在经历了某种变化。还有蛋白质为什么就是由这二十种氨基酸组成，其它氨基酸又是如何在竞争中被排除在外，生物膜怎样在历史中形成，在漫长的化学进化中生命的特征如何逐步发生，如此等等。总之，重组方法并未提供我们在自然史上化学进化——生命起源的有关信息，我们不能“以今论古”。生命起源的研究必须采用历史的方法，或如福克斯所表示的，新思想不得不是构造主义的（constructionistic），即遵循“由古到今，由简到繁”的路线。半德尼柯夫在1970年认为，原始的核酸不是DNA或RNA，而是XNA，后者的可变性大，核苷酸少，约50—150个残基。日本学者认为“聚甘氨酸是地球上产生的最原始的蛋白质”。胡文耕认为，他们“把原始地球上初生的蛋白质、核酸与经过几十亿年发展的现存的蛋白质与核酸区别开来①，这在方法论上是合理的”，因为“体现了发展的观点”。

从化学中的情况来看，重组方法是十分有效的。我们分解分子至原子或较大分子到较小分子，然后再由原子或小分子合成原来的化合物并从理论上阐明之，那么自然界由原子层次演化生成分子层次的过程也就弄清了。为什么这一方法用于生命起源的研究就失效了呢？这是因为虽然由原子演化到分子与由分子演化到生命都是沿着量子阶梯上

① 原文为“把经过几十亿年发展的与地球上初生的蛋白质、核酸与现存的蛋白质与核酸区别开来”，似有误。见胡文耕：“分子生物学中的哲学问题”47，天津，1962年。

升，组织化程度更高，更为有序，然而二者之间却存在有本质的区别。一种化合物（不是生物大分子）只要弄清了它的组成与结构，化学家通常就能设计出由元素或小分子合成的路线。相比较而言，向分子演化的途径只是一步或很有限的若干步，而且过程较为确定而必然。然而向生命进化却要漫长曲折得多，在进化途径上还有各种偶然因素，有些现在生物体内不存在的化合物可能在自然史上起过作用。在由化学小分子形成生物大分子如蛋白质与核酸时还要许多小分子协同作用。要是我们以重组的方法在生命领域以今论古，我们即是试图循着一条排除小分子与环境作用的明确而必然的化学合成路线，而不是自然的进化途径，我们可以由此获得关于现代生命的一定知识，然而不能由此达到对生命起源本质——因而也是对生命本质的理解。这并非是不可知论，而是由于方法本身的缺陷所致。

鉴于由无生命界向生命进化的极其复杂性，目前这方面的研究在很大程度上还是经验的，还在摸索中进行。不过可以期望耗散结构理论等将对实验的设计起到指导作用，从而加快这一研究的步伐。

结构与性质，系统与功能

关于结构与性质、系统与功能等概念范畴的研究是一些很复杂的课题，涉及面极广。由于问题的普遍性，目前已经引起哲学家的关注。此处，只拟在化学与生物学的结合点上对此有所涉及。再者，结构概念的含义在历史上是不断发展变化的，目前不同哲学流派，不同的科学家对结构概念也有不同看法。为避免混淆与误解以及叙述方便，此处所述及的结构概念的含义是指思想体系从属于机械唯物论的经典化学的传统认识。对性质概念也作了相应的限定。

（1）结构与性质

结构与性质是化学家关心的概念范畴。结构概念在有机化学中提出并得到较充分的发展，主要用于讨论有机分子的结构。在结构概念形成与发展的同时，化学家也逐步形成这样的观念，即一个化合物的结构是与其它物质，与其环境无关的，因而也就是孤立的。其次，结构是稳定存在静止不变的（到本世纪二十年代化学家已开始发现上述观念的局限）。上述结构概念已大致能应付经典化学的研究，这也是因为在经典化学的认识水平，研究对象确是相对独立于环境而稳定存在的。

在化学家的词汇中，性质概念的含义，主要是指化学性质，即在化学反应中所显示的性质，当然也考虑到必要的物理性质。

经典化学家有了结构（包括组成）与性质这两个概念后，即可处理通常的化学问题。传统上对一个未知化合物的认识顺序是，先接触其宏观现象，用各种化学手段揭示其组成成分，并显示出各种化学性质，然后由此推断该化合物可能具有的结构，最后再以此来解释性质，并在化学上由较简单的化合物或元素来合成所研究的化合物，与原来的化合物相比较，若无异，则表明化学家已掌握了该化合物的结构。从长期的实践中他们认识到，结构决定性质，性质是结构的表现；由性质可以认识结构，而由结构可以解释性质。

以往的化学史表明化学家的这一认识途径是卓有成效的。即使在二十世纪后，在化学开始渗入到生物学领域之后，这一思想还是证明有生命力的，并对生物学家产生影响。

例如对于呼吸与发酵的研究，正是在化学家传统思想的影响下，才有可能使研究深入到单个的酶。在揭示酶——蛋白质的结构之前，对于蛋白质究竟是无一定结构的胶体还是有确定组成与结构的分子尚有争论。然而大多数化学家坚持认为若无结构就无从研究，也无法去解释性质。提出高分子概念的施道丁格在1927年写道：只有"与聚纤维结构同样的高分子结构才能使活细胞的事件组织起来。这里第一重要的将不是胶体现象而是化学结构"。化学家们坚定地按蛋白质具有确定结构的思想去进行研究，在与物理学家、生物学家的共同努力中最后获得成功。对DNA的认识过程也可以说明这一点，如对遗传中不变物的探索。后来，沃森感到，要想了解基因的活动，那么了解它们的结构是有用的。结构学派的佩鲁兹和肯德鲁强调研究三维结构的重要性，认为这是理解分子功能的钥匙。DNA结构的揭示是结构学派与研究性质功能的生化和遗传学派的结合。

（2）由结构和性质概念向系统和功能概念的过渡

经典化学家所理解的结构概念在本世纪二十年代已经暴露出问题。化学家发现真实分子是可变形的，因而要求一种"可塑的图形"。英果尔的中介论以及鲍林的共振论都是为了解决问题而提出的方案。而在化学家进入生物学领域时，曾经指引化学家前进的结构与性质概念就更显得捉襟见肘了。在生命体内，任何物质无时无刻不处于与其它物质的相互作用中。离开了这些相互作用，生命即流逝。早在十八世纪末，贝格曼就认识到从生物体中萃取出来的纯净产物由于本身无生命力而只能列为特别复杂的化合物。量子生物学家永田亲义指出，"晶体结构的X射线分析，提供了有关DNA、RNA和蛋白质构成的关键资料。这曾经是一种最富有成效的研究方法，但现在已经过时了"。因为"晶体是一种非生命结构，在细胞里是看不见大分子的结晶形式的"。纯粹的病毒之所以不显示任何生物活性，就是因为它只是脱离生命体而存在的晶体，是单纯的化学结构，而一进入生命体，与周围环境发生联系，就立即显示出十足的生命活性。生物本身也处于与环境不断交换物质、能量与信息的过程中，若将生物置于封闭体系，它就会走向无序而死亡。总之，孤立的结构观念在生物学中不再适用。

生命体中的生物大分子经常发生电子、质子的漂移，以及构象以至整个立体构型的改变，它们的结构每时每刻都处于变化之中。在生物的一生中，组成生物的各种元素的原子一直在替换，按一定指令，原子总是不断进入一个框架，在停留了长短不同的时间后再离去。这种"结构"显然是化学家所陌生的。正如恩格斯所指出，"蛋白体在每一瞬间，既是它自身，同时又是别的什么东西"。不仅如此，在生物学中还要更多地考虑时间箭头的指向。例如在受精卵的发育中，染色体上的DNA与蛋白质以及环境存在什么样的关系，如何随着时间的先后严格地按一定规则逐一起作用，开放与封闭，以完成各种细胞的分化。在生物的起源与进化中，也要涉及在时间的长河中核酸、蛋白质以及膜怎样历史地形成并演化至今等等问题。总之，静止不变的观点已不再适用，而要代之以历史的、发展的观点。

结构概念在生物学中暴露出种种缺陷，与之相关的性质概念在生物学领域也同样发生贬值。在生物学中所涉及的不仅是化学性质，而且要考虑功能问题。更明确地说，在生物学中主要研究的是功能而不是性质。性质可由单一的化合物在某一反应中表现出来，而生物功能则是许多化合物，在若干协同的反应中，由整个生命体表现出来。生物的功能并不只是与单个化合物联系在一起。换言之，在生物功能的水平上并不能推知个

测化合物的结构，反之，由某一个别化合物的结构或各个孤立的化合物的结构也不能解释功能。这样，在进入生物学领域时，原有的性质概念以及关于结构与性质关系的观念就显示出种种不适应的状况。

二十世纪的头二、三十年里，化学家，生物化学家发现生物具有将自身组织起来的功能。按照惯例，他们试图由这一"性质"去发现"组织者"。若能发现"组织者"并阐明其结构，那么生命的本质也就昭然若揭了。在更早些时候，斯贝曼（Spemann）曾假定组织者产生某些特殊的化学物质，组织者通过它们来施加影响。德比尔与J·赫胥黎甚至在1934年宣布，业已查明，组织者几乎无疑就是"类脂"以及或许"类固醇"。但"组织者"的观念不久就为人所遗忘。艾伦写道，在当时"不可避免会假定组织者有一简单的化学和物理基础，而适宜的实验分析将会发现这一基础"。艾伦将此归咎于当时所盛行的机械方法。更具体地说，是由于关于结构与性质关系的传统观念已不再能完善地应用于生物领域了。组织并非是单一物质的作用，而是在历史上逐步演化的系统内部，以及系统与环境的相互作用过程。这一事例说明，不可能在由生物整体表现出的功能的水平上揭示某一物质的结构。遗传学的研究揭示了基因的存在，然而要探索其结构就不能停留在生物功能的水平，而要与从物理和化学角度的研究结合起来，即研究其化学与物理性质。科学史已经证明了这一点。

另一方面，从单一化合物的结构或各化合物的结构之"和"也不能解释生物的功能。1953年DNA双螺旋模型的揭示标志分子生物学的研究进入了一个新的时期。然而从以上分析中我们可以发现二者之间的某些区别。在建立了原子模型与量子力学后，科学家即可由原子结构推知原子的各种性质，同样，在由电子水平阐明了分子的结构之后，化学家也能基本上推知分子的性质。由沃森与克里克所阐明的是DNA晶体，而不是存在于生命过程中的物质，所确定的是DNA的孤立的静止的结构，而不是处于变动与关系中的系统与组分（参见后文）。独立于生命过程之外的静止的孤立的实体并不能说明生物功能。单是DNA的双螺旋模型并没有告诉我们遗传的详细过程与机理、生物的新陈代谢，更不用说发育与进化了。即使我们揭示了所有有关实体各自的结构，我们也仍然不理解生命的本质。分子生物学家逐步认识到，关于DNA的完整的分子结构的知识并不必然提供关于生物功能的知识，尤其不能提供生物的自有序或进化的知识。只有把握了DNA等在自然史中的形成过程，与其他生物大分子如蛋白质以及大量化合物的相互关系，相互作用与变化，以及如何在特定环境中的协调作用与趋于发挥更佳的功能，我们才能达到对生命的本质的理解。总之，我们不能单由DNA（尽管它是如此重要）或各个互不相关的化合物、生物大分子的结构推知生物的全部功能。

结构与性质的概念以及关于它们关系的观念在化学中是成功的，在化学进入生物学的初期时的发展也证明了仍然具有积极作用。然而由于对象的不同，如果仅限于这些思想，那么就不再是推动，而是会阻碍、束缚科学的发展。结构与性质的概念必须过渡到系统与功能的概念，这也是与二十世纪后一直到现在科学强调从整体、关系、发展和演化的观点来进行研究的潮流一致的。

(3)系统与功能

生物学目前发展的一个趋势是，在向更复杂的对象进军的同时，逐步认识到生物体内各种小分子在生命过程中的影响，认识到相互作用的重要性。DNA内部各部分，

DNA与其它分子都处于不断相互作用和变动之中，此外，在传递信息及大分子属性的改变过程中都有小分子参与。量子生物学家永田亲义认为，“我们由此进入了分子生物学中最有魅力的领域”。只有弄清生命体内各成分间的相互关系、相互作用以及演化发展，才有可能揭示生命的本质。而系统理论即用于把握事物间的相互关系、相互作用与演化发展。

系统即是由相互作用和相互联系的若干组成部分结合而成的整体，它又总是与一定的环境发生联系和关系。在上述内部的以及外部的相互作用下，系统经历形成，发展演化以致消亡的过程。在一个生物系统例如细胞中，化学家所谈论的一切化合物都不过是构成系统的要素。固然这些化合物分别具有本身内部的结构，由于它们的结构而可以在系统中发挥各自的作用；进而在生命体中，更重要的是这些要素之间协调一致的相互作用，正是这些相互作用决定了生命体在不同环境中的特定功能。这不取决于个别化合物的结构，而且也不取决于所有化合物的总和①，而是取决于系统的整体。

不仅如此，系统还规定了各个要素，各个化合物在生命过程的不同时期的存在与否及存在的具体形式即它们的结构，例如在不同代谢过程中的酶，免疫作用中的蛋白质等；规定各个要素在什么时期起什么作用，例如在细胞分裂与发育中的核酸。

系统与经典化学家传统思想中的结构的不同之处还在于系统具有自组织性。系统由于自身内部以及与环境之间的矛盾运动而调整内部的各个要素，它们的关系与过程，对象总是被重新组合，以便使功能鲜明。

在生物学的概念体系中，与系统相对应的是功能。功能一词的应用十分广泛，从机器到生物，从日常生活到艰深的理论探索，因而我们不可能在这里下一个普遍适用的定义。若从生物系统出发来考虑，功能即是生物系统在与环境的相互作用中，通过系统内部的协调反应，所表现出使自身稳定、代代相传，并趋于与环境保持最佳适应状态的各种行为。在化学向生物学领域的渗透中，生物的功能越来越引起化学家的重视。例如近年来研究特定的生物医学高分子，要求能逐步接近于按照生物体内代谢功能的生化过程来进行医学治疗。何炳林等指出，“这已不同于以往单纯强调高分子化合物的合成和物性的状况了”。

系统与功能的关系有类似于结构与性质关系的一面，但也有新的内容。在结构与性质的关系中，结构是决定性的，性质则是结构的表现。在系统与功能的关系中，功能就不再只是被动的表现，而是体现了重要的必不可少的作用，这可以从两方面得到说明。首先在化学上，性质是具有一定结构的化合物在与环境相互作用时的表现，没有这种相互作用，不表现出性质，化合物还是具有原来的结构。另一方面，生物系统则每时每刻都在执行某种或若干种功能，执行功能实际上是生物系统的存在方式。例如胃溃疡患者胃构造的变化，长期处于失重状态的宇航员骨质的疏松等就说明功能对系统的反作用，这在化学中是没有的。氢氧化钠在煤油中放置一万年其结构也还不变，取出后也还是会与酸作用，但若停止系统执行其功能，必将导致系统的降解与解体。在这一点上系统与功能的关系有别于结构与性质的关系。

---

① 实际上，直到六十年代末还有人声称细胞不过是分子的集合，这正是上一世纪微耳和细胞国家的分子翻版。

系统功能关系不同于结构性质关系的第二方面是，为了要达到系统与环境之间的最佳适应即执行最优功能就会在系统内部作若干变动或调整。例如莫诺与雅可布发现的在有或无乳糖存在的情况下分子水平的调控过程，在免疫反应中蛋白质的变构等。这些变动通常是临时性的，一旦环境复原，系统也随之复原。在生物的进化过程中，系统内部发生某种随机的中性或非中性的涨落。那些非中性的涨落引起生物功能的改变若使生物在环境中能更好地生存就得以保存下来，反之则被淘汰。由上可见，功能并非只是系统的被动的表现，它也可积极地影响系统。

2000多年前亚里士多德就强调功能的重要性，把形式（大致相当于结构）看作是功能的衍生物，当然他的思想中贯穿了目的论，因而带有浓厚唯心主义色彩。在生物学成为一门科学后的漫长历史中，更多的是把功能视为形式的产物，这是与二十世纪前在自然科学中占主导地位的机械论思想是一致的，机器的构造决定它的作用，化合物的结构决定它的性质。十九世纪下半叶达尔文的进化论以及当时有关进化的哲学开始注意到功能的作用，但未曾根本改变上述认识。进入二十世纪尤其在五十年代后，人们进一步认识到功能的重要性。双螺旋模型提出者沃森与克里克认为结构从属于功能，每一结构特点必须与对DNA的生物需要相一致。人们之所以在唯物主义，在科学的基础上重新认识到功能的重要性，是由于现代的科学家更注意系统内部以及系统与环境的相互作用，意识到在一定意义上相互作用比物质本身更具重要性；也是因为进入二十世纪后科学家更多地以演化的眼光来看待世界。

自然，我们也不能由此而走向极端。有人提出"系统在本质上成了它自己过去的俘虏"。这在回顾历史的时候是对的，然而这只是问题的一面。另一方面，系统决定了现在的功能，并且以其内部的变化潜力而成为将来发展的起点。

(4)结构—性质范畴与系统—功能范畴的关系

生物系统是要执行一定功能的，系统由许许多多复杂程度不同处于变化与流动中以及相作用的化合物组成，化合物又各自具有自己的结构与性质。显然，在结构性质范畴及系统功能范畴间必然具有一定关系。

因为化合物具有特定的结构以及可在不同情况发生特定变化，因而才具有各种性质，才能在整个机体中发挥确定作用。没有各个具有特定结构的化合物以及可表现出的各种性质，系统内部即没有差异，只是一种无组织的类似于热平衡的状态，实际上并无系统可言，要执行功能也只是一句空话。另一方面把具有各种结构的化合物都放在一起，不建立起彼此的联系，系统犹如一盘散砂，也谈不上去执行什么功能。为了执行某种功能，体内需要什么化合物，要求它具有何种结构以及在什么情况下发生变化，需要化合物在某一时刻表现出它所具有的多种性质的哪一种，以与体内其它化合物所允许表现的性质协调作用等等，这些都要在系统整体的水平上作出控制、在更高的水平上受到制约。

究竟是化合物的结构还是生物系统起作用？正如有的科学家问道：记忆是由于某些物质的作用还是组织整体的作用？更早些时候瓦尔堡就敏锐地问道："是细胞作用还是酶作用？"他正确地答道："这里丝毫不存在对立——（强调酶作用的）化学家和（强调细胞作用的）生物学家都是正确的"。总之，系统中的每一组分都同其内部结构而具特定性质，这是系统执行功能的基础。各组分按一定规律组织成系统，在系统的统一指挥

下发挥各组分的特性协调作用以执行整体的功能。这就是结构性质范畴与系统功能范畴这两组范畴之间的关系。

因而为了深入探索生物系统及其如何执行功能等问题，就必须查明其组分，研究它们的结构与性质，在这一方面物理学家与化学家还大有用武之地。另一方面随着研究的深入，又必须弄清各组分的关系，相互作用与演化发展，以探索生命的本质。这里化学家就要学习以系统与功能的观点来从事研究[①]。

(5)关于人工合成生命

在合成生物大分子的工作中，通常强调"人工""合成"，这实际上即是化学合成，排除借助于酶、微生物或基因模板的方法。然而在研究过程中，化学家越来越发现只依赖化学方法来合成生物大分子的困难，更不必说生物体了。为此，考拉那小组创造了酶促合成与化学合成相结合的方法，四十年代有人采用微生物合成的方法，七十年代末，上海生化所在化学合成四核苷酸的基础上用酶催化得到16核苷酸，从而将酶促合成与化学合成结合起来。尤其是最近出现用基因模板的方法来"合成"一些复杂的化学上无法合成的物质，这与本来意义的"合成"有本质区别，一个小小的基因就开辟了一条新的合成道路。另一方面，有人根据耗散结构理论指出，单用化学方法合成生命是不可能的，是类似超运算的问题。

从前文的分析我们可以看到，这些实际上说明化学与生物学的本质区别。不可能单用化学方法来合成生命。化学合成的是化合物，是晶体，而不是生物系统。生命由自然长期进化而成，而不是现代生命的分解（或理论上分析）之后的重组。在"合成"生命的道路上，不能狭隘地拘泥于化学合成，要注意贯彻系统的思想，不能只着眼于现在，而要从历史的观点出发，与生命起源的研究结合起来。

总之，生命界是远为复杂的领域。由DNA双螺旋模型的揭示而拉开序幕的生物学革命正方兴未艾。要提出象物理和化学中量子力学和量子化学这样的理论体系作为生物学中演绎的出发点并非指日可待，为将生物学革命推向前进还要作大量探索性工作。在这里化学大有用武之地。而在陌生的领域中用武之时，化学家也不要忘记改善乃至更换习用的武器，以在向生物学的渗透中发挥更大作用。

吕 乃 基

7.天体化学、地球化学和环境化学的哲学探讨

化学是在原子和分子水平上研究物质客体的结构和变化的科学，如果所研究的客体是地球以外的空间物质（天体），那就是天体化学；如果所研究的客体是地球行星，那就是地球化学；如果所研究的客体是人类的生存环境，那就是环境化学。这三者的时间尺度和空间尺度十分久远广大，相对而言，则：外层空间＞地球行星＞人类生存环境。

---

① 在上文中我们对结构、性质、系统、功能概念作了某些限定。实际上，客观事物都是辩证联系的，不存在绝对的非此即彼的情况。相应地，我们可以扩大结构与性质的外延至生物学领域，或反之。但我们在讨论中，就必须将概念固定下来，以利于作进一步的哲学分析。

上述关系无论从空间上说，还是从时间上说都是成立的。因此，从总体上看，天体化学已把地球化学蕴涵在内，而地球化学也已把环境化学蕴涵在内。三者的尺度（其中尤其是前二者的尺度）极大地超出了地面化学实验室的范围，从而极大地开拓了人们的视野，产生了许多新的思想和新的问题。

天体化学：天体在化学上的同一与星际有机分子的意义

天体化学的基本目标是为宇宙天体描绘一幅统一的化学图像。在上个世纪，人们通过对“天外来客”陨星的元素分析和对太阳等为数不多的恒星的光谱分析，得到了关于陨星和恒星的若干零星的化学知识。最近一、二十年来，人类通过登月旅行取回了月球卫星表面的试样；从行星探测器获得了有关行星表面化学组成的可靠情报；采用更尖端的谱线分析技术，探测了遥远的为数众多的恒星和星云的化学成分。这一系列的最新成果，使关于天体的化学组成和演化的系统研究成为可能。这样，才诞生了天体化学。依据其对象的不同形态，天体化学又可分为行星化学、恒星化学和星云化学等若干分支。目前研究得最多的，当然是“我们这个宇宙”——太阳系。在元素水平上的太阳系研究，达到了定量的水平。

虽然从太阳大气层及各行星表面可以检测到各种天然元素，但在不同的星体上，各元素的含量有重大的差别。内行星或类地行星和小行星主要由岩石组成，岩石的成分主要是铁和镍以及硅等。外行星中的木星和土星主要由氢和氦构成，天王星和海王星主要由氢、氧和氦构成，而太阳的成分主要也是氢和氦。然而，从太阳系整体来看，各元素的相对含量(即所谓元素丰度)却呈现出一定的规则性，这就是著名的“Suess—Urey宇宙丰度”曲线。图5.2这条曲线是休斯(Suess)和尤里(Urey)将太阳的光谱分析数据，地球地壳的元素丰度以及陨星的元素分析数据加以综合处理而得到的，它反映着太阳系中元素分布的规律性。即元素丰度随着质量数的增加而按指数减少。这种规律性只有采用元素的演变以及在演变过程中所产生的各种核具有不同的稳定性特征等原因才能予以解释。正是在这一点上，这条曲线的意义大大超出了太阳系的范围，它为人们探索在宇宙大尺度中进行着的元素的“生成”和“死灭”提供了一把钥匙。

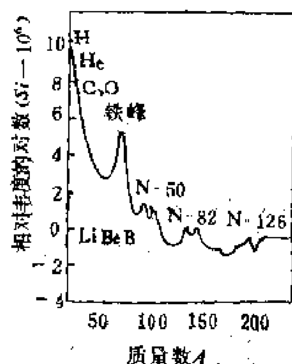


图5.2 元素（同位素）在宇宙中的相对丰度

尽管在发现元素的天然放射性现象以后，随着核科学的进展，人们阐明了元素演化的机制，并进而在地面上实现了元素的裂变和聚合，但这仅仅是在狭小的规模上进行的；而天然发生的元素演变，却是在宇宙的巨大规模上进行的。因此，必须提出一些理论模型或假说，这些模型不仅合乎原子核反应的机理，而且还能说明元素的宇宙丰度。

四十年代以来，已经提出了不少关于元素演化的学说，其中具有代表性的有四种，这就是平衡过程假说，中子俘获假说、聚中子裂变假说和恒星中生成元素假说。前三种假说可以归之为“一次生成说”，它们都把近百种元素的生成处理成一个单一的过程，因

而都不能较全面地说明元素的宇宙丰度。最后一个假说（亦称B^2HF模型）抛弃了单一过程的构思，吸取了上述三个假说中的可取之处，提出了与恒星演化的不同阶段相适应的元素生成历程（图5.3）。它不仅充分运用了原子核反应的机制，而且还能较好地解释元素的宇宙丰度，是目前为止最为令人满意的元素演化学说。

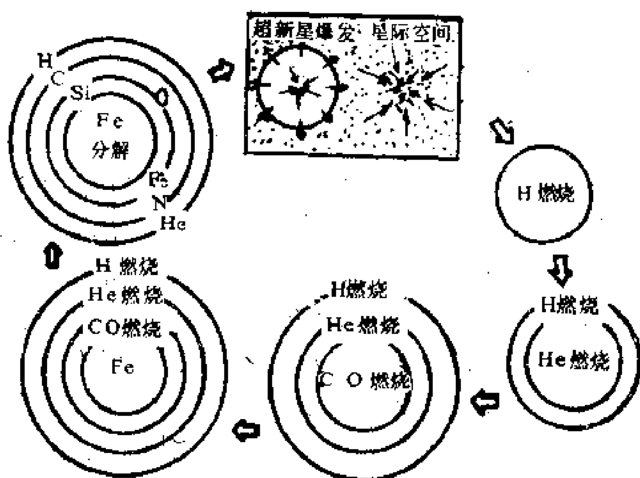


图5.3　恒星演化中的核化学过程

如图5.3所示，B^2HF模型把恒星视为“炼制”各种元素的“锅炉”。这“锅炉”以氢为原料，在其发展的不同阶段上，“炼制”出不同的元素。反过来说，正是由于不同原子核的不同特性，才造成了恒星演化的不同阶段（当然还得其它条件的配合，如引力）。这就是关于恒星的化学。在恒星的化学中，关于原子核反应的微观机制同恒星在演化的不同阶段上宇观的可观测的现象（如超新星爆发）达到了内在的统一。这不仅是宇观与微观在化学组成方面的统一，而且还是两者在化学过程方面的统一。

在太阳一类恒星那么高的温度下，元素不可能以结合成化合物分子的状态存在。而且一般地说，由于从恒星发出的强烈的紫外辐射，星际介质对分子的生存来说是一个极不适宜的环境。然而，在一种由尘埃和气体构成的巨大的暗星云里面，却发现了一氧化碳、羟基、水、氨、氰化氢和甲醛等双原子和多原子的分子。这是一项划时代的重大发现，严格说来，天体化学是由于这些发现而诞生的。星际分子能在暗星云中稳定地存在，表明星云中的尘埃微粒能有效地屏蔽紫外辐射。但这些分子是如何在暗星云中合成的？由于这类星云被视为新的恒星的母体，在未来的恒星演化过程中，它们的命运又将如何？从它们开始，会不会象在地球上已经发生过的那样，进一步合成出具有生命特征的更高级的物质？这些都是天体化学或者天体生物化学所要研究的课题。

由于我们对行星地球上的生命起源的问题还没有获得解决，有理由期望，星际分子或者更精确地说星际有机分子的发现，或许是为解决这个问题打通了一条途径。一种得到公认的行星演化理论认为，地球也是由那样的暗星云凝聚而成的，因此，在行星凝聚和增长的过程中这些星际分子是否保存了下来，并进而实现了生命的生成，这是一个值得研究的课题。

一般认为，地球在形成后的最初几亿年里非常热，将导致有机分子的分解。但在随之而来的冷却过程中，原始星云中的有机分子会通过某些途径发生作用，首先，它们将被冷的地球表面吸积，其次，伴随着行星形成而产生的更小的凝聚物（流星和尘埃颗粒），包含着温和得多的化学过程，这些过程可能从星云的原始分子中产生出更复杂的和更具有生物学意义的分子。后一种过程已在碳质球粒陨石的研究中得到了证实，在这类陨石中发现了氨基酸和其它一些有生物学意义的分子。

因此，如果假定在冷却中的地球以足够的速率吸积了大量的流星和尘埃，那么合成前生命分子的重要来源可能是陨星和宇宙尘埃。

这样，从太阳系整体和演化的角度去看，地球上生命的“种子”存在于它的胚胎——原始星云之中，只是由于地球与太阳之间的适当距离造成了适宜于生命种子“发芽”的环境，才使“接种”工作得以实现。把生命起源的“陨星说”斥之为“外因论”或“上天创造生命”等等，是把眼光囿于地球本身的结果。

由于暗星云中有机分子的发现，人们关于“宇宙生命”的信念得到了增强。从暗星云演化为恒星的过程中，行星系统的出现是一种正常的现象，据估计，在银河系一千亿个恒星中，也许有十亿多个恒星有着地球那样的带有生命物质的行星。当然，“宇宙生命”的形态也许是多种多样的，但它们都应具有“自我复制”的本能。甚至在地球上也发现了不同类型的生态系统，那就是在大西洋底部的火山口处，在充满了硫化氢的还原性气氛中生存着一类特殊的生物。总之，生命并不是太阳系中才有的特殊的唯一的现象，而是宇宙的普遍现象，在广漠的宇宙中，甚至象人类那样的智能生命，也不是孤立的现象。

地球化学：地球的化学演化和地球上生命化学起源的条件

前面提到，地球化学是在原子和分子水平上研究地球的化学组成和演变的科学。对于地球构造的不同层次，地球化学划分成相应的分支学科。对于地幔和地核的研究还处于襁褓之中，目前研究得较多的是地壳化学。在地球层次构造中的地壳是广义的，狭义的地壳仅指地球岩石圈，而广义的地壳除岩石圈外，还包括水圈和大气圈。在地壳范围内，地球化学又分成了岩石化学、水体化学和大气化学。人类的生存环境是处于岩石圈、水圈和大气圈三者交汇处的狭窄的地表圈层内（生物圈），以这个圈层为对象，形成了环境化学。它是在解决人类环境问题的推动下，综合岩石化学（包括土壤化学）、水体化学和大气化学的成果而形成的，是环境污染化学的姊妹学科。

地球化学的另一个角度是把地球作为一颗行星、一个整体去研究，而要研究行星地球，就必须把它放到相应的环境即太阳系中去才行。从这一层次上说，地球化学乃是行星化学的一个分支，而行星化学乃是天体化学的一个分支。正是在这个层次上，提出了关于地球（或行星）的化学演化以及在地壳表层中出现生命即地球生命的起源这两个当代科学的前沿课题。

关于行星起源的系统研究是从十八世纪开始的（牛顿）。此后，曾经发生过以康德—拉普拉斯星云假说为代表的“渐变论”，同以布丰的碰撞假说为代表的“灾变论”的学术之争。两派的主张尽管不同，但作为出发点的前提却是相同的，两派都假定行星形成前的物质是炽热的气团，行星就是由这种气团冷却收缩而生成的。

进一步的研究表明两派的观点都存在着不可克服的困难。从本世纪四十年代起，人们对“炽热的气团”这个共同的前提也产生了怀疑。现在，大多数人都认为行星是恒星演化过程中的产物，它同恒星一样，是起源于冷的原始尘埃云。从这个前提出发，提出了各种行星演化的模型。

有一种被许多人接受的模型认为，原始的太阳是在银河系中发育而成的一团巨大的冷尘气云。尘气云在其引力坍缩的不同阶段上，从赤道处分离出一个一个分立的气体

环，这些气环通过吸积作用凝聚而成各个行星。

图5.4显示了类地行星的大小，吸积的能量、行星的温度以及所经历的主要化学变化。在这个演化历程中，火星大体上代表了它的最初阶段，金星代表中间阶段，而地球则代表最终阶段（相对而言）。只有水星是例外，因为它紧靠太阳，温度高，在吸积作用的初期阶段就发生了强烈还原作用，因而还原程度最高（铁镍核心占全部质量的3/4）。

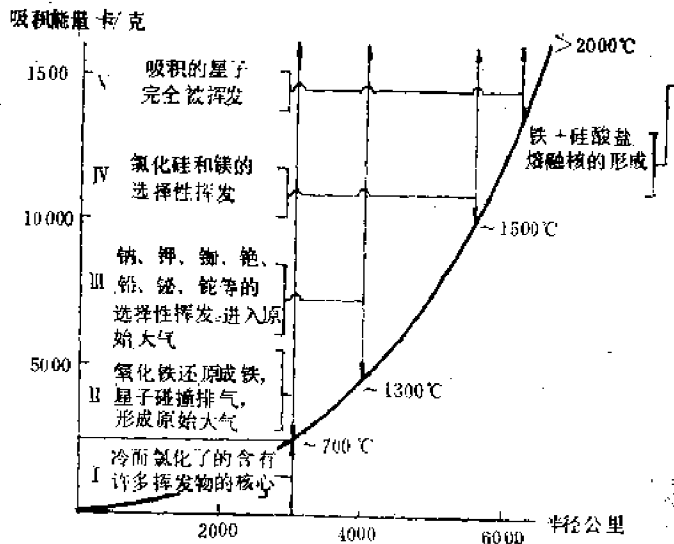


图5.4 吸积能量和类地行星半径之间的关系

上述模型表明地球是“从里向外”发育的，在吸积的第一阶段，形成了一个含有某些挥发性物质的冷而氧化了的地核，但越到表面还原程度越高。当地核增长到一定程度，由吸积作用产生高温，在表面生成熔融的金属团块（主要成分是铁），金属块因密度大而穿过固体物质下沉，该过程使地球的平均温度迅速增高，当达到2000℃时，有许多硅酸盐类从地幔外层挥发进入大气，而原来冷的氧化铁核心渗入地幔。这种对流运动使年青的地球呈现十分剧烈的变动状态。

这个模型以氧化还原反应作为基本的化学机制，要求产生一个铁的核心和一个大质量（相当于地球质量的1/4）热的大气层。这个大气层在稍后阶段应脱离地球，成为形成月亮卫星的母体。后来的作为生命诞生的环境因素之一的原始大气层，是由形成中的地壳的排气作用生成的。

这个模型的基本思想，是把地球乃至整个行星系统视为由原始的太阳这个恒星母体中逐渐发育而成的，太阳系中的现存的各个行星，是处在不同的演化阶段上。这种将地球同其它行星加以比较，将太阳及其行星系统视为一个整体的观点，正是前述康德—拉普拉斯星云模型所体现出来的观点，从这个意义上说，现代星云说乃是康德—拉普拉斯星云说在新的科学基础上的复活。

地球的进一步演化形成了地壳、地幔和地核的层次构造。约在30多亿年前，在地壳的外层，出现了太阳系内最伟大壮丽的奇迹——地球生命物质从无生命之物中诞生了。人们不禁要问：地球生命究竟是如何产生的？现在我们离最终揭示这个奥秘也许还相当遥远，但是有一点已经做到了：这个问题已经由哲学家们的论题变成了化学家们的实验设计课题。前面我们提到过这个问题，介绍了从星际有机分子和碳质陨星去寻求答案的可能性。其实，从元素到原始的生物体要经历漫长的化学进化历程，需要多种条件的配合，因此，“陨星说”即使能够成立，也只能填补其中的某一段进化历程。一个基本的事实是，在太阳系范围内，按迄今所知，生命只是在地球环境中才得以出现。从太阳系

行星演化的角度，探索地球生命化学起源的环境条件，这也是地球化学的任务，但限于篇幅，关于生命的化学起源问题就不在这里多谈了。

环境化学：人与环境的辩证关系

在人们当前所面临的各类环境问题中，污染是一个突出的问题，其中化学污染又占了百分之八、九十。因此，预防和治理化学污染，是解决环境问题的首要环节。环境化学就是由于这种需要而产生的，它研究化学污染物质在环境中的分布、迁移和转化的规律性，以便为防治污染提供基本理论和基本方法。因此，所谓环境化学实际上是环境污染化学，它包括大气污染化学、河流、湖泊、海洋等水体污染化学以及土壤污染化学等分支学科。目前研究得最多的，是区域性的大气和水体的污染问题。

在环境化学中，环境一词是指人类生存的地球生态环境，包括地表生物圈内的各种无机物质（阳光、水、大气和多种盐类等）和生命物质即生物界。所谓"环境污染"，一般地说，是指环境中所发生的对人类不利的变化。这种变化或者有损于人体健康，或者影响人类所需的食物，或者影响人类赖以生存的自然环境，或者通过加害于生物界而间接地影响到人类。总而言之，对人类是否有害，成为环境化学的最终的评价标准。

污染有天然的和人为的两种，而现代的环境污染，则绝大部分甚至全部是由人类自身的活动所引起。令人遗憾的是，人类大规模的生产活动，出发点是要制得对人类有用的产品，提高人的生活质量，但结果却常常事与愿违，在获得有用产品的同时，破坏了自己的生存环境，不仅降低了人类生活和生产的环境质量，而且还可能产生令人难以预料的威胁生存的长期的不良后果。正是由于看到了这一点，近二、三十年来世界有识之士不断大声疾呼要解决环境问题，保护人类的生存环境，而各国政府对此也已经越来越予以重视。

全球性的以及广大区域性的环境污染的出现，以及别的环境问题，都迫使人类不得不重新审查自己的活动方式，并考虑这样一个带有根本重要性的课题，即：人类如何才能取得同自然环境协调一致的发展？这就是所谓"人和自然地理环境相互关系"的问题。如果说，这个问题过去还只是供哲学家们磨练他们的思辩能力的论题，那么在当代，这个问题已经走出了哲学的殿堂，而成为由所谓"实证科学"进行探讨的课题了。环境污染化学是探索这个课题的途径之一，它将在化学的水平上，即原子和分子的水平上，阐述人类活动对环境所产生的影响，以便为改善人的活动方式，求得与环境的协调发展提供科学的指导。

值得指出的是，在论述环境问题时，所谓"人与自然"的提法是欠妥的，还不如提"人与自然环境"或"人与环境"要好些。环境概念的最基本的含义，是指围绕着某一中心事物。我们提环境，总是意指某一事物的环境，脱离了所环绕的中心事物，环境也就失去了任何意义。总之，环境是以它所围绕的中心事物为转移的，一旦规定了第一事物，同时也就规定了它的环境。这样，环境同它所环绕的中心事物紧密相连，成为一个整体。相比之下，自然或自然界这个概念是歧义的。首先，人本身归根结底也是一个自然物，是属于自然界的。其次，自然既可以指任何客观的存在物，在这个意义上人们常常将它等同于宇宙；也可以指任何不以人的意志为转移的客观变化的趋势或规律性，在这个意义上它又是所谓"必然"。当我们讲"认识自然"的时候，我们不仅指认识客观

存在物，而且更重要的是指认识客观规律性（自由是对必然的认识）；当我们讲“改造自然”的时候，我们仅是指改造现存的客观存在物，因为规律是不能改造的。同样，所谓“人与自然”是指什么呢？是指人同宇宙？人同人？还是指人同客观规律性？还是指人同它的生存环境？显然，在环境科学意义上，在论述当代环境问题的意义上，指的是最后一层意思。因此，用“人与环境”这个提法就比较准确。

环境研究表明，污染物质对环境的破坏和长远影响是在自然环境演化的原有基础上即环境地球化学的背景（本底值）上进行的，因此，污染是由人类活动产生的污染排放源与环境因素协同作用的结果。在地球化学看来，所谓化学污染“不过是地球环境物质分布不均一性基础上的新的叠加。”①

地球化学对环境本底的调查指明，许多对人体有害的物质在环境中本来就存在，只是它们分布极为分散，含量极低，不足以构成现实的威胁。毒理学研究也告诉我们，离开某物的浓度去谈论它是否有毒，是没有意义的。同样，环境化学揭示出，化学污染不仅取决于污染物本身的生理化学特性（对生物体而言），而且更重要的是取决于它在环境中的量即浓度。

从量上看，污染物同环境的叠加有负的和正的两种情况。负的叠加是指污染物通过环境介质的扩散、降解等作用，减轻或消除了污染，这就是环境的自净作用。环境科学强调指出这种自净作用对人类来说是一种十分宝贵的自然资源，人类一方面应当合理开发和充分利用这一资源，以节省治理污染的费用，另一方面更要避免对这种资源的滥用，多少个世纪以来把大气和水域当作公共的免费垃圾桶的传统观念应当彻底改变。

正的叠加是指与“自净”相反的作用，环境因素构成了污染的必要条件之一，这时，污染乃是人类活动（污染源）与环境共同作用的结果。在逆温条件下的烟气污染，光化学烟雾，毒性小的无机汞在水体中转化为毒性大的甲基有机汞以及生物食物链对污染物质的富集作用等等，都说明污染的形成不仅要有排放源，而且还要环境的配合。当然，排放源是其中主要的和主动的因素。

显然，所谓“正”的或“负”的叠加，只是从人的利益出发而作出的不同评价。就环境本身而言，这些叠加都是中性的，都只是污染源的排放物在环境介质中发生了某种分布、迁移或转化，无所谓“正”和“负”。在这里，我们再一次看到环境科学的一个显著特点，那就是它直接以人的利益为评价标准，而所评价的对象却是环境中的自然过程。环境科学是以保护人的利益为出发点的，将人类活动与环境条件作为一个整体去加以研究的科学。在它面前，关于自然科学和社会科学的传统划分也失去了意义。由于它的出现，传统的社会科学脱离了人的生存环境而孤立地研究人类活动的缺陷开始得到弥补。

作为环境科学的一个分支，环境污染化学从其自身的角度，揭示着人类活动对环境的影响以及可能产生的后果。

例如，从地表元素的迁移来看，由于现代采掘业将大量的原来埋藏在地下的化学元素带进地表环境，人类活动已经成为一支主要的地质营造力（参见表5.1）。人类的这种有力的地质营造活动，势必打破工业化之前的元素的环境地球化学平衡，引起元素的环

① A.A.别乌斯等：《环境地球化学》，科学出版社，1982年，2页。

表5.1 每年经河流入海洋的若干元素的量

元　　素	地球化学速率 (每年径流入海的量)	由人类活动造成的速率 (开矿等)
铁	25000	319000
锰	440	1600
铜	375	4460
锌	370	3930
铅	180	2330
汞	5	7
锡	15	166

境地球化学异常。这种异常对人体或生物界的影响一时还难以预料，这是一个需要十分谨慎地对待的问题。在区域范围内，某些重金属元素如汞、铅等的危害已经表现出来。

再如，由于化石燃料的大量使用而引起大气二氧化碳浓度的增加，以及由于大量使用氟里昂、氮肥以及喷气式飞机的高空排放物致臭氧保护层遭到破坏，这两个问题直接关系到人类的生存。有人认为，二氧化碳的增加会改变地球的气候，从而造成不利影响。而破坏臭氧层，将使人失去天然的保护伞而受到强烈的紫外杀伤。如果真是那样，那么人类及地球上大部分生物将会灭绝。这似乎骇人听闻，但它是环境科学研究所发出的一个有价值的警报，人类对此绝不能掉以轻心。

现代工业不仅大规模开发和利用着地球上天然形成的各种原子和分子，从而打乱了它们原来的环境地球化学平衡，而且，科学和工业还在不断地利用天然材料创造出环境中原来没有的分子和原子。这些东西对于在原先的地球化学环境中进化形成的人类和其它生物来说，都是些陌生的客人。它们对主人的态度如何？请进这些客人来，对主人是否有利？它们会不会做出“恩将仇报”的事来？这些都需要谨慎对待。事实上，关于DDT、多氯联苯和六六六的教训永远值得记取。如果说，在不远的将来，由于化石燃料的耗尽而由此引起的化学污染问题也会自动消除，从而环境化学也就失去了这方面的对象的话，那么，在对新创造的物质进行监测方面，环境化学还是有事可做的。

人类现行的工业活动，是建筑在大量使用不可再生的化石燃料能源的基础之上的，这就使它一方面面临化石能源枯竭的危险，另一方面又带来严重的环境污染。解决上述问题的根本出路，在于开发利用新的能源和无污染的新技术、新工艺。因此，现今还占主导地位的传统的技术必将被新的技术所代替，人类与环境也将在新技术的基础上获得协调的发展。这是环境科学研究所追求的关于人类活动的理想模式。有理由相信，人类将不断地“逼近”这个理想模式，尽管还可能会碰到种种艰险甚至不幸。

闻 龙 暑

（三）化学与新技术革命

1.新技术革命与化学

近三十年来，科学技术的发展突飞猛进，在各个领域中都获得了重大的突破。目前，国际上正在热烈地讨论"第四次工业革命"，也有的叫第三次浪潮、信息革命、新的技术革命等等。尽管说法各异，但有一点是肯定的，即科学技术的进步，对劳动生产率的提高将起着决定性的作用。因此，我们应当正视新的技术革命，研究新的技术革命，充分利用新的技术革命给我们提供的机会，以加速我国的"四化"建设。

当前，所谓新的技术革命，是以电子计算机、生物工程、材料、激光、光通讯、能源、空间科学、海洋开发等为标志的。这是因为，这些领域已经或可能获得重大的新发现，并且将带动其它有关学科的发展，极大地促进经济和社会的发展。

化学是主要的基础学科之一，它是研究物质分子及其聚集态的组成、结构、性质和变化的规律的科学。在1752年罗蒙诺索夫曾写道："化学研究具有双重的目的：推进自然科学和增进普遍的福利"。化学是化学工业的基础，而化学工业又是六个高技术水平的工业之一。因此，化学同技术革命有着密切的联系。在历史上，化学曾为前几次工业革命作出过贡献。十八世纪七十年代，应用化学知识，首先在英格兰用煤冶炼铁矿石，使之成为第一次工业革命的标志之一。第二次工业革命发生在十九世纪四十年代，是蒸汽机、铁路和酸性转炉炼钢的时代，其中化学工业发挥了巨大作用。本世纪初，爆发了第三次工业革命，是以电力、化学制品、汽车为代表的时代，化学工业是三大支柱之一。

今天，化学和化学工业又进入到一个崭新的时期。到目前为止，已知的元素或原子的种类共有109种，已发现的放射性同位素有一千五百多种，生产的放射性同位素品种达三千多种，已知七百多万种化合物，在实验室制得的有机化合物有五十多万种，工业生产的有一万五千多种，随着科学的发展，从化学学科中又衍生出一百五十多个分支学科。现在，化学学科已从宏观、定性、静态阶段，向着微观、定量和动态方向发展。电子计算机已成为人们运用严格的量子化学计算方法来测量任何化合物分子结构和性质的有效手段。计算机不仅成功地用于化工生产过程的控制，而且在新型特殊材料的分子设计和最佳实验方案设计方面，也展现出了广阔的前景。

新的技术革命的每一个领域，与化学都有着密切的联系。可以毫不夸张地说，如果没有化学家的密切配合，任何重大的技术突破都是不可能的。例如，解决能源问题，必须寻找低成本的太阳电池材料，研究其它的再生新能源，试制高密度的聚能绝缘材料；发展快速准确的通讯，必须生产十亿分之一高纯度的光导纤维；开发超大型集成电路，必须要生产廉价的硅片；制造电子计算机，必须要研制存贮器用的新型的磁性材料；空间开发，必须为火箭提供高能燃料；开展生物工程的研究，必须提高酶制剂和各种必需的化学方法和技术，等等。有人曾预计，到二十一世纪，人类将向着合成粮食目标迈进，这也要依靠合成化学家的努力。这里，有机化学是最能引人注目的领域之一。合成化学家们简直像魔术师一样，他们运用新的化学理论和技术，能够设计和合成出千百万种化学物质来。八十年代以来，人类平均每天创造出一千多种新的化合物。但是，他们

并不满足，正在向着揭示生命秘密的目标迈进。

化学的重要性是显而易见的。在新技术革命中，它是可以大显身手的。为了推动化学学科的发展，要求我们作出多方面的努力。其中之一就是认真掌握好唯物辩证法。正确运用这个理论武器去从事化学研究，并不断总结新技术革命向化学提出的新任务、新要求，以哲学的高度去认识当前化学中出现的新问题，概括总结化学中不断涌现出来的新资料，从中锤炼我们的理论思维能力，为促进新的技术革命和开创四化建设的新局面作出新贡献！

刘　道　玉

2. 能源与化学

能源是指能产生各种能量的所有资源。能源的开发利用是人类赖以生存和社会发展的物质基础。能源科学技术的发展，在历史上曾成为科学技术革命的突破点。目前，能源、材料、信息被誉为现代科学技术发展的三大支柱。在未来新的技术革命中，能源仍将占有重要地位。

能源与化学有着密切的联系，尤其自进入二十世纪以来，两者的关系更为密切，研究两者的相互联系、相互制约、相互促进，对加快能源和化学科学技术的发展，都会起着有益的作用，也将会为拟订能源的发展战略提供有益而必需的依据。

能源与化学关系的由来

煤炭工业虽然已有二百多年的历史，但它与化学发生联系是从上世纪中叶开始的。当时欧洲实现了从煤气中回收焦油和氨，以及从煤焦油中分离出苯、酚、苯胺等化工产品；同时美国打出了世界上第一口油井，并开始对石油进行简单的蒸馏分离。本世纪以来，煤化工有了新的发展，出现了从煤焦生产电石，用电石生产乙炔，再用乙炔合成乙醛、醋酸等工业，同时，用煤合成氨也实现了生产工业化。第二次世界大战以后，石油化工迅速发展起来，陆续形成了庞大的石油化工生产体系。煤的流体化也提到议事日程上来，使能源与化学的密切联系出现了相互促进的新局面。

由于化学在能源开发利用中的作用日益显著，所以能源科学技术的发展，又会不断地向化学提出新的课题，促进了化学工业的发展，从而形成了燃料化工体系（主要包括着煤炭化工、石油化工、天然气化工）。

此外，能源科学技术的发展，还向化学提出了理论问题，甚至有些很重大的理论问题。其中，关于模拟酶催化剂的研究和合成，就是突出的实例。酶是生物体内具有很好催化功能的蛋白质，其催化效率比非酶催化剂要高出10万倍以上，甚至高达10万亿倍。但生物体内的酶易受外界因素的影响而失活，稳定性差。现代化学研究已能模拟酶分子的结构和催化作用原理，而设计、合成出酶型催化剂。虽然这种模拟酶的催化效率比生物体内的酶差，但因模拟酶的结构简单，既易合成又较稳定，可实现大规模的应用，在能源的化学转化中，将会显示出巨大的作用。模拟酶的研制，还促进了有机合成理论的发展，对整个化学工业的开发都有指导意义。

能源的化学课题，还有综合性的特点，这不仅体现在能源的综合利用中，而且体现

在新的能源转化材料的研制中。如有机金属电池的研制就涉及到量子化学、结构化学、有机合成化学、电化学等多方面的理论知识。这些综合性的研究工作，非常有利于综合性学科（如能源科学）的发展。

能源与化学的关系，相辅相成。化学各基础学科的研究成果，又反过来促进了能源科学技术的发展。如合成化学关于双元素（或多元素）催化剂的研制，物理化学关于催化剂同时具有均相和非均相两者优点的研究，无机化学关于转化催化剂改性的研究，以及关于复合催化剂的研究等等，它们将会对能源的化学转化产生深远的影响；核化学关于核裂变的发现和核反应规律的研究，为原子能的开发利用提供了理论根据；有机金属化合物的性能和结构的研究，为发展新型的有机金属电池奠定了基础；深入研究闭合循环工艺的科学原理，将使能源的化学转化过程发展成为无污染的工业。

开发利用能源的辩证法

能源的综合开发利用是能源科学技术发展的主要趋势之一，也是一个重大的研究课题。讨论能源的综合开发利用中与化学有关的几个辩证关系，将为解决合理地开发利用能源问题提供可遵循的原则。

（1）实现能源形式的合理"转化"是综合开发利用能源的关键

在能源科学技术中，所谓"转化"，就是把能源的自然形式转化成最有效而方便的使用形式。能源按其物态有固体、液体和气体等形式。能源产生的能量形式更是多种多样，如机械能、热能、电能、光能、化学能等。在实际应用中，并不是所有的这些形式都是有效而方便的，一般最大量使用的是热能和电能。所以，必须经过转化环节才能达到合理利用的目的。而且能源的开发利用过程，包括着开采或开发、加工、转化、运输、储存和使用等许多环节，其中的关键是转化环节。

在能源的转化中，向电能的转化是人们最重视的转化工作。这是因为电能较易转化成其它能量形式，转化率可高达80—90%，而且远距离输送，既方便又经济，也好控制和管理。可是，目前世界各国的能源转化率还比较低（包括向电能的转化）。转化率最高的日本只有57%，美国51%，其他国家低于50%。

化学转化在能源的转化中有着多种功能和广泛的应用。

煤炭是固体，如直接用作能源（如发电、炉灶等），不论从运输、利用的效率看，还是从方便灵活性看，都是不利的。所以，煤炭的化学转化（即液化或气化），就有了新的发展。把煤炭经化学加工处理而转化成液化气、合成汽油、柴油、燃料油，可作为优质能源，具有使用方便、运输费用低等优点。煤炭的地下气化，不论对改善开采，还是输送和保护环境，都是值得重视的化学转化方式。

石油向二次能源转化，通过一次加工和二次加工，提高转化率和汽油的辛烷值（85-92）。目前，石油的转化过程，正在向深加工发展，以便提高能源的利用率。

太阳能通过光电池转化成电能，虽然不属于化学转化，但光电池转化率的高低却与制造光电池的化学过程有密切关系。化学提供优质的功能材料，是提高太阳能向电能转化的关键。太阳能电池在宇航事业和空间技术的发展中，负有特殊的使命。把太阳能电池送入太空，组成大型太阳能电池板，把转化成的电能通过微波技术送回地面，是大规模利用太阳能的可能前景。所以化学在制造价廉、高效的太阳能电池方面，将会发挥重大

的作用。

原子能的转化也离不开化学工作。在原子能发电中，核燃料需要循环进行化学处理，才能长期维持核电站正常运转。

水虽然不能直接作为能源，但经化学转化后，从水中提取的氢，就成了非常理想的能源。一是因为水在地球上的储量特大，而氢经燃烧后又会生成水，可称之为取之不尽、用之不竭的能源；二是因为氢既可以作燃料电池，也可用于直接燃烧而无污染，可称之为最优质的能源。把水转化成氢，不管采用何种措施和技术，都离不开化学转化。

化学电池，虽然具有价格贵而寿命短的缺点，但在当前仍有很现实的重大意义。化学电池能起到交流电所起不到的作用，它不仅为人们提供了直流电源，而且在信息、交通、采矿等工业和人民生活中（尤其在农村和偏僻的边远地区），是不可缺少的能源。

能源的化学转化不是任意的，而是有条件的。我们要重视转化过程的研究，把握转化的规律性，积极创造条件，促使能源实现有益的转化。化学转化往往需要在一定的温度、压力等条件下才能实现，因此为了实现能量形式的合理转化，必须不断发展新技术、新工艺、新设备。如磁流体发电新技术，蒸汽一燃气联合循环发电新设备、炼焦新工艺、煤炭直接液化新工艺等。由此可见，加强化学转化的研究及其合理的实现，不仅是综合开发利用能源的关键，而且将导致能源科学技术发生革命性的变化。

（2）耗能（吸热）和供能（放热）的辩证关系

化学工业是工业能源的主要消费者之一，仅次于冶金工业。据美、日等国的能源消费情况统计，化学工业所消费的能源量约占工业总消费量的20%。因此，化学工业中能源的合理开发利用，不单是关系到化学工业经济性的问题，也是关系到能源开发利用全局的问题，而且煤化工、石油化工和天然气化工本身就与能源的开发利用联系在一起。所以，现代化学工业在其发展过程中，非常重视节能问题的研究和解决。

化学工业生产过程，不仅有吸热反应，还有放热反应，而且有的化学反应既吸热又放热。因此，怎样正确处理这种关系，以便合理地利用能量，就是个很有实际意义的命题。

化学工业生产过程包括着很多与利用热能有关的单元体系和装置，如加热器、换热器、干燥器等。所以，化学工业中的能量损失，大部分表现为热量损失。如30万吨乙烯装置，其热量损失占总能量损失的56%。

现代石油化工采用先进的管式加热炉，大量用作炼油常减压、接触转化、直接脱硫、乙烯裂解及氢气转化等装置，热效率可高达92%。

换热器主要用于回收余热和废热。比较先进的技术是热管换热器，能回收低位热能。

合成氨工厂根据化学吸热反应和放热反应有耗能和供能的特点，通过改进工艺过程，采用高效废热锅炉，利用反应过程的废热，可基本上满足生产过程所需要的动力和热量。这是一种比较理想地开发利用化学反应热的方案。

缩短工艺流程，减少耗能设备，可达到更好的节能效果。在这方面，催化剂的研究、改进和采用起着显著的作用。这是一种降低能耗最有效而前途无量的方法。所以，不断改进催化剂提高活性、选择性和耐久性或发展新的催化剂，可使化学合成、分离、纯化工艺过程简化；使用寿命的延长，可使催化剂本身的再生过程简化或次数减少。所有

这些作用的结果，都会使能耗大幅度下降。如生产丁、辛醇的传统羰基合成工艺，需要140—180℃和280—350大气压；可是采用催化剂的新工艺后，只需要80—120℃和14—18大气压，而且主、副产品的比例由原来的4∶1提高到10∶1。

（3）正确处理污染和防污染的关系

能源的化学加工处理过程，会出现严重的污染问题。如在煤的液化、气化厂中，有废气、废液和废渣的污染；在石油的炼制中，会产生毒性物质的污染等等。但是，这仅是问题的一个方面，化学过程还有清除毒物防止污染的功能，化害为利。

使用化学处理方法清除污染，已在能源工业中引起了人们的注意。如火电厂采用石灰或石灰石吸收法除硫；在煤矿产地或油田区进行化学加工，变成二次能源后再向外输送，可减少污物扩散和对大城市的污染。为了充分发挥化学过程清除污染的作用，不仅把污物尽量消除在化学加工、处理过程中，促进了无污染工艺或低污染工艺的发展，而且促进了无毒能源的发展。如采用能源加工与化工联合配套开发利用的办法，可增加副产品的回收率，减少污染；在催化剂存在的条件下，利用太阳能分解水而制取氢燃料，就是一种比较理想的方案。虽然这仅是目前的一种设想，但却引起了人们的兴趣和注意。

（4）合理发挥一种资源两种功能的作用

煤炭、石油和天然气，既是目前主要的能源，又是主要的化工原料。自本世纪以来，随着化学工业的飞速发展，这种特点越来越明显。两种不同类型和具有不同功能的工业争夺同一种资源，这个矛盾直接影响着能源工业和化学工业未来的发展，已成为在新的工业革命中不可回避的矛盾。要正确地解决这个矛盾，从近期看，能源工业和化学工业互争煤炭、石油和天然气的局面，还会延续相当时间。因此，把能源工业和化学工业联合起来，强化化学加工过程，搞好综合开发利用，充分发挥一种资源两种功能的作用，仍然是一个可行的方案。但从长远观点看，不能只限于资源的综合利用问题，还要涉及到能源的发展战略和整个国民经济建设的发展战略问题。

关于能源的发展战略问题

目前，煤炭、石油、天然气和原子能四种能源的开发利用占世界能源总消耗量的90%以上。有人预计本世纪末和下世纪初，将以煤炭和原子能为主要能源。这是有可能的。但问题并不这样简单。必须综合考虑各种因素，尤其那些关系到长期发展战略的因素，正确处理好它们之间的关系，方有可能提出比较合理的开发利用能源的战略方案。

自世界进入工业社会以来，能源的发展，有从短期到长期，从化学能到核能的趋势，但界限不是绝对分明的，世界的能源结构成为多因素体系。当然，各种能源也不是并重，而是有主有次。事实上，单一的能源结构，不可能完全满足社会各方面的需要，而需要的能量形式就更多种多样了。必须走综合开发利用的道路。综合开发利用，在这里包含着两种意义：一是对现有的能源进行综合利用，二是开发各种新能源，充分发挥各种能源的作用。

目前，在其它能源所占比重较小的情况下，煤炭、石油和天然气自然是能源结构的主体，所以，怎样加强对这些能源的开发利用，也仍然是重要课题。但是，从长远观点看，把煤炭、石油、天然气节余下来，以满足未来化工发展的需要，是真正的上策。尤

其对我们这样一个人口众多的国家，为了掌握未来的主动权，更应重视其它能源的开发利用。像太阳能、水力能、地热能、风能、潮汐能、波浪能在我国都有开发的可能，尤其水力能，我国还有不少未开发利用的好条件。但是，由于这些能源受地区时间条件限制较大，开发量有限，在未来能源的结构中占比重不大。所以，除了从综合利用方面充分开发利用外，还要大力重视其它能源的开发。目前看来，最有基础和可能的是原子能。如果原子能发电能为我国的电能需要提供50%左右，那么，我国将会把石油、煤炭大量节余下来。

从更长期的需要和发展看，应从三方面要求衡量新能源的价值。一是储量大或循环使用，二是能实现大规模的开发利用，三是使用方便而无污染。从当前已经认识的自然界看来，如果不经工人改造，符合这三个条件要求的能源是没有的。聚变能和氢能的开发利用，都有满足上述三个条件的可能。尤其是氢能，由于氢的来源是储量极为丰富的水，水经分解制得氢，而氢经燃烧后又变成水。只要大规模地制氢过程不产生污染，这就是非常理想的未来能源。由上述可见，化学在能源开发利用方面，不仅在本世纪，就是在下一个世纪，也将会起着重大的作用。

张 道 民

3. 材料与化学

材料是现代技术革命的基础要素。如何研制新材料，发展材料工业，这是哲学和材料科学需要认真思考的问题。

材 料 的 地 位 及 其 分 类

材料在工农业生产、国防建设和科学技术的各个领域中，发挥着越来越大的作用，一个国家材料生产的情况，反映了它整个国民经济的现代化程度。现在，各发达国家都十分重视材料的研究和发展。在美国180万人的科技工作者中，有50万人从事材料的研究。

日本也非常重视材料问题，他们认为能否在以后的竞争中取得胜利，能否永远保持自己的国家是一个先进的工业国，就要看材料工业是否处于世界领先的地位。1984年4月，日本在基础工业局建立了"基础新材料对策室"，专门研究新材料的发展情况，和需要迅速采取的相应措施。4月下旬，他们又紧接着成立了发展新材料的咨询机构"基础新材料研究会"，成立这个研究会的目的在于促进节能，节省资源和技术进步，促进信息技术、宇航技术、海洋工程的发展。现在，日本正在积极筹建"尖端材料评价网络资料库"，这个资料库由评价中心（评价网络）、数据库、判断机能小组三部分组成，这个资料库能准确、迅速地提供新材料研究的信息。通产省还计划在最近建立由钢铁、石油化工、有色金属、建筑材料等厂家联合参加的团体——"基础新材料工业学会"。他们在去年还曾组成一个由十几个厂家参加的"新材料研究会"。据日刊《工业新闻》5月份报道，通产省还准备办一所"新技术研究大学"，其中，有一个系，专门从事新材料的研制，从而促进电子技术、宇航技术、海洋工程和生物工程的研究。现在，他们正在着手制定《促进开发新材料法》，试图用法律保证新材料的开发。他们把高分子材料、精

密陶瓷、非晶质金属、超导材料、新型复合材料为代表的材料工业，作为“战略性工业”之一。据通产省预测，2000年以后，他们新材料的市场将会达到63万亿日元的规模。

一种新材料的出现，往往会使人们的生产和生活产生巨大的变化。人们曾把材料做为历史分期的标志，如，石器时期、青铜器时期、铁器时期等等。再如，在建筑史上，有人主张分为四个时期，这四个时期就是按建筑材料进行分的：（1）泥土茅草时期，这时，古人用泥土、茅草建筑低矮的小房子，至今，在某些落后地区还能找到这样的建筑。（2）砖瓦木料时期，古代遗留下来的建筑物，大部分为这个时期建筑的，以砖木配以石料，再加白灰和生漆，作为建筑材料，建筑物的特点是跨度、举度都比较小，使用面积和建筑面积的比例也比较小。（3）钢筋水泥时期，自从使用钢筋水泥为建筑材料以来，建筑业就出现了划时代的巨大变化，出现了许多高层大跨度的建筑群，从而产生了现代化的成市。钢筋水泥的使用，还给交通运输有关建筑带来革命性的变化。（4）不锈钢、钢化玻璃、合成树脂时期，这种建筑是最现代化的建筑，坚固、耐用、舒适、敞亮、封闭性好，可以很好地调节温度和湿度，外表看来，状如水晶宫。从上述可见，如果没有材料的革新和进步，就不会有现代的建筑业。

材料是当代技术革命的基础，任何新技术的发展，都对材料提出相应的要求。没有单晶硅材料，就没有今天的电子工业；没有核能材料，就没有原子能工业；在海洋工程中，在宇航技术中，都要求有适合于这种技术的新材料，没有材料，新技术革命就会成为“无米之炊”。1978年，我国在制定科学规划中，按着专家们的建议，把材料科学列为重点，这是完全正确的。

现在，世界上的新材料层出不穷，1976年注册的有25万种，到现在已经超过了30万种。如何对这些材料进行分类，这是材料科学和材料工业面临的一个十分迫切的问题。

对材料的分类，因为不同的需要可以有不同的标准。如可以按产地、来源、时代、组成、结构、功能、使用范围和使用寿命等方面，把材料划分为各种不同的类型。按来源分，可以把材料分为天然材料和人工材料；按时代分可以分为古代、近代和现代材料。现在，一般是按组成、结构和功能进行划分，如，按组成可分成无机材料（金属、合金、陶瓷、玻璃、水泥等）、有机材料（橡胶、塑料、合成纤维等）、复合材料（玻璃钢、夹层玻璃、金属陶瓷、复合网络结构材料等）。按结构分，可以分成晶体结构、非晶态结构等类型。按功能分，可分为单功能材料和多功能材料。按材料的组成、结构和功能来划分材料的类型，是有积极意义的，因为，人们对材料的研究，主要是研究其组成、结构和功能。

人类对材料的组成、结构和功能的认识

人类在对材料研究的五千年的漫长历史中，主要是不断加深对其组成、结构和功能的认识。现在，这种研究正在从宏观走向微观，从只凭经验进行实验配方，发展到严密的理论研究。

在十七世纪以前，化学还处于襁褓之中，人们对物质结构的认识还非常肤浅，所以那时的材料科学只是从宏观上研究组成和性质的关系。例如，在瑞典，十七世纪已有相当规模的玻璃生产，他们只懂得用不同的配方生产不同的玻璃，对玻璃的微观结构还一

无所知。他们已制出了钴玻璃，但他们还不知道钴是什么，他们把不可捉摸的钴矿称为“地下妖魔”，甚至到教堂中去祈祷，让上帝保佑，免受这种“地下妖魔”的危害。

随着化学的发展，科学进一步揭示了材料的组成和性质的关系。认识到，材料的不同宏观配料，会产生不同的性质和种类。从而逐步学会了制造各种合金、陶瓷、玻璃和其它硅酸盐材料。

进入本世纪以后，由于化学、物理学的迅速发展，使人们懂得了材料结构和功能的关系。例如，相同的金属材料，由于不同的处理方法，因而使其微观结构不同，功能会有很大的差别。把金属熔液迅速冷却，使之在不结晶的情况下凝固下来，从而可以制成微观结构高度无序的金属材料，这种材料叫非晶态金属材料，其导电性、延展性、抗腐蚀性都非常好，它和同类金属材料具有同样的组成，但由于微观结构不同，所以性能各异。

现代对复合材料的研究，使人类在材料的研究历程中，从分析走向了综合，从只分析单一材料的组成、结构和性质，进而研究多种材料的综合性能。例如，对超音速飞机和火箭燃气吹转的涡轮叶片材料的研究就经历了这样一个过程。燃气喷射速度达9000米/秒，温度达1400℃，起初用单一的金属材料试制，结果都不理想。后来又改用陶瓷，也不理想。再后来用钨、钼、镍等金属丝与陶瓷复合，结果还是不行。六十年代末七十年代初用碳纤维与陶瓷复合，制成了理想的材料。科学证明，两种以上的材料进行复合，如果它们之间，能很好地协同，就会兼有各种材料之长；相反，如果它们彼此不能很好地协同，就会兼有各自之短。什么样的材料才能彼此协同呢？实验证明，共性越多的材料，彼此越可以相容，这叫“相似相容”，“相似相容”的材料，彼此就能协同。如钢筋水泥二者之间，膨胀系数极为接近，可以相容，故能协同，所以钢筋水泥，兼有钢筋和水泥二者之长。

总之，人类对材料的认识，经历了以下阶段：组成和性质——→结构和功能——→组成、结构功能的综合研究。这一过程体现为，从单一到复合，从宏观到微观，从经验到理论的辩证发展。

材料科学的未来

目前，绝大部分发达国家，都把材料科学当成战略基础学科，把材料工业视为关系到国家前途和命运的重要行业，都在拼命地搜集人才，大量投资，广泛研究，力图在竞争中占据有利地位。

为了迅速发展新材料，赶超世界先进水平，就要对新材料的发展趋势加以研究。

现代材料行业向着高度分析和高度综合的方向迅猛地进展着。一方面力图研制出高纯度、高均匀度的单一材料。例如，现在研制出的硅单晶其纯度之高是已往的材料无法比拟的，达到了99.9999999999%，其结晶的秩序性也十分强，畸变和位错极少。

高纯度材料在新技术革命的各个领域用途极大。例如，铁的理论强度为2000公斤/毫米^2，但由于杂质的存在，仅达到400公斤/毫米^2，金属位错理论指出，如能很好地消除金属材料微观结构中的畸变和位错，金属的强度可以普遍地增加一百倍，这种理论对金属的变形、疲劳，都做出了很好的解释，并提出了切实可行的预防办法。

另一方向就是高度综合。研制新型复合材料，把新型高强度的有机材料与金属材料

复合，从而制出具有宝贵性能的新材料。例如，去年英国研制出聚丙烯水泥板、纤维增强水泥板等，这些新型建筑材料质轻、坚固、建造工艺简单，是很有希望的新材料。用玻璃纤维和轻金属复合后制成的新材料，可以制造卫星和火箭的外壳。用高折射率的玻璃纤维做芯心，用低折射率的玻璃做包皮，套制起来就是光导纤维。这种纤维有独特的性能，在电子、通讯、全息照相、自动控制、医疗器械等方面有广泛的用途，是当今信息社会中不可缺少的材料。

复合材料，克服了单一材料在性能上的不足，综合各种材料的宝贵性能，从而可以在许多极端情况下工作，如能经受超高温、超低温、高压、真空、强光照、放射性辐射、强磁场、强宇宙线等情况，因而是现代化技术中不可缺少的材料。

高度的分析，制成高纯度、高均匀度的单一材料，这是研制新型复合材料的基础；高度的综合，研制新型复合材料，又对单一材料提出新要求。

在材料科学的分析与综合过程中，要深入了解物质的微观结构。目前，对晶体结构有了很深入地了解，但对非晶态结构了解得还很不够。近年来，非晶态理论有了很大的发展，但对非晶态无序结构的定量描述，还有许多问题急待解决。

王德胜　周嘉华　廖正衡

4. 信息与化学

信息是现代科学的一个重要概念，它渊源于消息。

对于人类来说，信息的传递始自远古的年代。为了交流感情与思想，人类创造了语言，自古以来，语言就成了传递消息的重要工具。后来，人类又创造出文字，更丰富了传递消息的手段。从古代的石鼓文、甲骨文，钟鼎文以至今天的汉字、其它民族文字，都是传递消息的重要媒介。

此外，我国古代还用烽火台传递边塞军情，古罗马地中海一带则用悬灯报告敌人进犯的消息等等。

以后，传递消息的方式越来越多，手段也越来越先进。诸如较早时期的两军对阵，擂鼓助战、鸣金收兵，军队挥舞旗语进行问答和致意，夜航的船舰闪亮探照灯光以通消息，风讯台悬挂各种标志向航船通告气象与航情，摩斯电码用一组组的四位数字传发电报……，这些传递消息的方式和手段，至今仍在人类社会中发挥着重要作用。

信息、信息论与信息科学

信息概念源于消息，但并不等同于消息。信息作为具有一般性质的科学概念被提出来，还只是十九世纪三十年代的事情。当时，玻尔兹曼把熵与信息联系起来，从而为信息的科学概念的产生和信息量的测度，作了理论上的准备。

1928年，哈特莱发表了《信息传输》，他在自己的著作中，首次提出信息是代码、符号，它是具体的，代表着信息的具体方式。1948年，申农从信息编码这一方面出发，把信息定义为“两次不定性之差”。而控制论的创始人维纳则从滤波理论这一方面出发，于1950年把信息概念概括为：“信息是组织程度的度量”，“是负熵”。并明确提出信息的定义：所谓信息，就“是我们适应外部世界，并且在使这种适应为外部世界所

感到的过程中，同外部世界进行交换内容的名称”。后来，费希尔又从古典统计理论方面提出了单位信息量的问题。

经过申农、维纳和费希尔等人的工作，建立了现代信息论，明确了信息论是主要研究消息的信息量、信道容量、消息的编码问题、噪声理论、信号滤波与预测、调制与信息处理等问题的一门新兴学科。1951年，美国无线电工程学会率先承认了这门新兴学科。

七十年代以来，信息理论从通信领域广泛渗透到其它学科，研究领域大大扩展，迅速进入复杂系统、大系统、超大系统，如航天、人脑、智能、社会经济等各类复杂系统。而研究对象也大为扩张，对信息概念、信息熵、语义信息或意义信息、有效信息（信息价值）、模糊信息及相对信息等方面，从质和量的统一上，从信源、信息、信息使用的整体上，从客观信息与主观信息的统一上进行研究，从而出现了一个崭新的系列科学群——信息科学。

研究信息，就离不开承载信息的物质。信息的物质载体通常有四类：（1）文字的信息以纸张为载体；（2）声音的信息以空气为载体；（3）电话、电报、雷达、无线电通讯、电视、光通讯等均以电磁波为载体；（4）动物与动物、植物与植物以及动物与植物之间，特别是昆虫之间的信息传递，以化学物质为载体。人体或动植物体内的信息，也是以化学物质为载体的。由此可见，信息与化学有着直接而密切的关系。

化学物质与信息

化学物质为信息科学技术提供了物质基础，诸如显示信号所需的液晶，以及荧光屏所需的各种新型荧光材料等等。1974年，法国的化学工作者，合成了氟化玻璃。用这种玻璃制成的玻璃纤维，其光导性能比公认最好的石英纤维还要高出10—100倍。众所周知，光导纤维通讯是当前新技术革命的九大支柱之一。显然，上述氟化玻璃纤维是为远距离信息传递提供的又一种理想的材料。我们有理由认为，当代信息科学所需要的一系列新材料都离不开化学。

但与化学联系最为密切的是化学信息。

化学信息可以分为两类。一类与某些特殊的化学物质结构有关，这些化学物质称为化学信息素。在自然界中，昆虫世界的种内联系或通迅，就是靠这种化学信息素传递的。

信息素按其作用的不同，可分为七种：（1）性信息素，它是分泌至体外，引诱或激发异性昆虫交尾的化学物质；（2）告警信息素，昆虫遇敌时放出这种信息素，以使其它伙伴识别敌人；（3）标迹信息素，有社会性的昆虫将其分泌于所经路径上，可以给同伴指示行走路线；（4）聚集信息素，当昆虫找到食物后放出这种信息素，以呼叫同伴取食；（5）产卵引诱信息素；（6）自卫信息素；（7）蜂王物质等。

昆虫的信息素，是很强的生理活性物质。如雌蚕蛾分泌一种叫做孕烯二酮的激素，这种激素分子在空气中扩散，足可以使4公里之外的雄蛾接收到信息，给雄蛾指出求偶的飞行路线。又如，得州切叶蚁（*Atta texana*）分泌的标迹信息素是一种叫做4-甲-2-羧-吡咯的甲醇酯，其活性阈值为0.08皮克（pg）/厘米^2。照此推算，只要0.33毫克就足以布绕地球一周。

不仅昆虫世界有化学信息，植物界也有化学信息。蕨类和裸子植物的脱皮激素，能够防御虫害，如有昆虫接触到这种激素，就可使昆虫变形、绝育甚至死亡。其它植物如鸟足三叶草、车轴草、芹菜叶、荨麻刺毛、烟叶、苍耳等，都能合成自卫信息素。在人体中，激素以体液（血液和组织液）传输的方式，弥散性地把控制信息送到人体的各个部位，使机体自动控制系统保持内环境稳定。

另一类化学信息与某些物质的化学变化有关。这种化学信息是通过化学变化过程传递的。

神经传递信息过程，除了电的作用外，在突触部位传递信息的是化学物质。这些叫做神经递质的化学物质有二十多种，象乙酰胆碱、5-羟色胺、脑啡呔、环-磷酶腺苷等等。通过它们在神经元内的合成、贮存、释放、分解等一系列过程传递信息。这也是一种非电磁的化学信息过程。

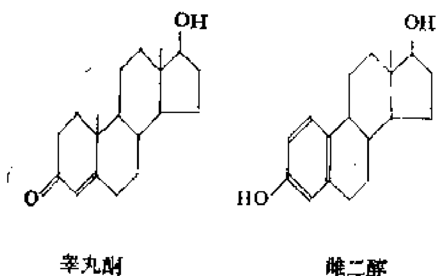
DNA双螺旋分子结构的发现，使人们认识了遗传信息。这一发现不仅使分子生物学取得了长足的进步，而且也促进了信息科学的发展。

可见，研究化学信息物质如何形成、储存、传递，也是信息科学的一个重要内容。否则，我们对信息的认识就不是全面的。更深入地研究化学信息的本质及其物质基础，必定会深化和丰富人们对信息的认识。

化学信息与化学结构

任何信息都不能离开物质而独立存在，化学信息也是如此。但是，并非任何化学物质都可以作为化学信息的载体。化学信息的存在，仅与某些具有特定结构的物质有关。

天然性激素是一类化学信息的物质载体。它们有着共同的物质结构基础，都由甾环化合物组成。在这种主体结构不变的情况下，雄激素（如睾丸酮）和雌激素（如雌二醇）在局部结构上有着微小的差别，如下列结构式所示，这就使它们传递的信息大不相同，从而引起了性别的差异。



睾丸酮　　　雌二醇

在生物中，细胞通讯几乎完全直接依赖于分子的结构形状。在新陈代谢中，蛋白质就是根据它们对不同代谢物质的结构形状的选择能力而传递信息的。

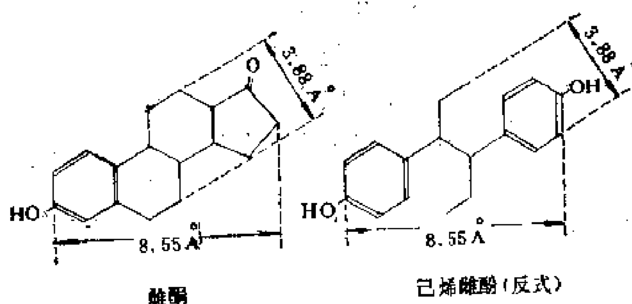
分子生物学中谈到的遗传信息的传递，同样受结构的制约。DNA的转录、翻译和复制，也是基于互补链区的物理一化学表面的相互配对嵌合，来进行工作的。由于结构的原因，腺嘌呤（A）只能和胸腺嘧啶（T）配对，而不能和胞嘧啶（C）结合。只有严格地按着碱基配对原则（A—T、G—C），DNA分子的化学信息才能传递。

可见，化学信息只有借助于物质的特殊结构才能存在、储存和传输。化学信息一定要依附于化学物质，换句话说，化学信息对物质和物质的结构的依赖具有绝对性。

一般说来，特定的物质结构可以体现特定的化学信息。而对于特定的化学信息，有时候所对应的不是唯一的结构，而是对应着一类相似的结构。

例如，雌激素作为化学信息的载体，与它的立体结构有密切关系。天然性激素都

是甾体化合物，雌酮中就具有甾核。而己烯雌酚（反式）虽不具有甾核，但是它的立体结构和雌酮极为相似，且空间尺度相等，长度和宽度均分别为8.55埃和3.88埃，如下式。因而，它们所体现的化学信息也基本相同。



雌酮　　　　己烯雌酚（反式）

由上述实例可知，就化学信息只有借助于特定的结构才能存在、储存和传输这一点而言，化学信息对于物质结构的依赖具有绝对性；而从有时候与某一化学信息相对应的结构不是唯一的这一点看，化学信息对于物质结构的依赖又具有相对性。所以化学信息与化学信息素不是等同的一回事。

以上只是对于第一类化学信息的结构基础所作的初步探讨。对于第二类化学信息来说，它们同样与化学物质的结构有关。但它们同时还与结构的变化，即化学物质的动态结构有关。例如，经过对脑啡呔以及脑中RNA的研究，已有人提出"记忆分子"的假说。这正是用化学物质储存信息的过程。它从另一方面说明了化学信息与物质的关系。对这方面内容的进一步研究，不仅具有重要的科学意义，而且具有丰富的哲学意义。

研究化学信息的科学意义

化学信息可以由别种形式的信息转化而来，也可以转化为其它形式的信息。随着对化学信息认识的不断深入，人们已经并将继续从信息这个角度揭示出物质的化学运动形式与其它运动形式、化学学科与其它学科之间的深刻联系，从而推动化学、信息科学以及其它相应学科的发展。

化学信息与其它形式的信息的不同之处，主要有以下几点：

首先，它存在于静态或动态的化学物质的形式之中。其它信息则不然。例如，语言信息以文字的形式存在，电磁信息以电、磁的形式存在。

其次，化学信息的储存和传输以微观的化学物质粒子的运动或变化的形式出现。例如，花香以分子蒸发的形式传递化学信息，水生动物的信息素则通过在水中的扩散而起作用。

再次，化学信息一定与物质的结构直接相关。而其它形式的信息则不然。例如，语言信息与文字间的结构有关，按一定语法规则排列的文字包含一定量的信息。但是，这种文字排列的结构绝不是物质的结构。

由于化学信息具有这样一些特点，并且各种形式的信息之间可以互相转化，所以，从研究化学信息入手，有助于人们对信息本质的进一步认识，并由此促进相应学科的发展。

比如，有人提出，RNA和多肽物质可能是学习和记忆的基础，也就是说，人们在学习过程中所获得的记忆或经验，可以在这些大分子中"编码"。如果真是这样，那么，只要我们认真研究其中的化学信息，它将会解决心理学的难题，并且对新一代计算机及人工智能模拟的发展，都具有巨大意义。

研究化学信息可以促进医学的发展。科学家们发现，人体某些内分泌系统的疾病，是由于缺乏正常的信息。传染病则是由于异种蛋白或毒素带来了异常信息，扰乱了机体的正常细胞功能。遗传病则是由于化学信息代码的错乱所引起的。如果我们能对这些化学信息有深入的了解，便可以诊断疾病，并能找出相应的治疗方法及药物。

研究化学信息还能促进化学仿生学和农业的发展。现在，人们已经可以辨认出某些昆虫所发出的化学信息，并能够人工合成相应的信息素，用它来诱杀害虫，其效果比通常的农药喷洒效率高，而且不污染环境。

有些生物经野外生存竞争的磨炼，化学感很强。老鼠的嗅觉本领很强，其侦破能力较狗有过之而无不及。老鼠经过训练，能区别D-和L-香芹酮，或D-或L-辛醇-2。据报道，已有利用老鼠检查行李中藏爆炸物的事例。还有利用昆虫侦探和破案的报道。这都展示了利用化学信息的广阔前景。

化学与信息的关系是多方面的，化学信息与其它学科的联系也是多方面的，以上仅仅是浮光掠影地作了一些介绍。

随着化学科学与信息科学的发展，一定还会揭示出它们之间更为本质的关系。同时，一系列丰富新颖的哲学内涵，也将陆续展示在人们面前，需要化学工作者和化学哲学工作者密切关注，协同探讨。

张家治　邢卫平　任定成

（四）化学哲学研究的前景

研究化学的哲学基础以及化学中的哲学问题，对于化学学科的建设和发展具有十分重要的意义。因为一门自然科学或化学学科要得到发展，除了不断地从观察、实验中获取经验材料之外，还必须进行理论思维活动，要有概括这些材料的理论框架。这正如美国著名量子化学家、诺贝尔化学奖获得者霍夫曼所说，化学是一个活的生物——一种不断扩大的无定形的领域，它不断前进和扩展，它能运动和前进，它可以轻快地前进，也可能艰难地缓行。而理论就是这个生物的一种基本的神经系统，由它来组织科学前线的信息，将这种信息联结于积累起来的知识库中，并由它来在许多不断进步的领域中进行通讯联系。理论的特点就在于它总是跟随着实验，但没有理论则实验是不能生存的①。化学中普遍性更高的理论往往具有哲学的形态，它们给化学提供借以思考问题和组织经验资料的理论框架或逻辑结构。

回顾一下化学史上的一些重大发现或理论的提出，可以发现，它们都离不开一定的哲学观念，或以某种哲学观念作背景或框架来组织观察资料并为下一步的探索指明方向。波义耳提出了科学的元素概念，从而使化学确立为科学，然而，“波义耳的全部工作都受一种理论的指导，他把这种理论称作‘微粒哲学’”。“他自有一套机械论宇宙观，认为物质和运动才是宇宙的基本质料。……波义耳根据这一完备周密的原理进行了各种各样的实验，力求用物质和运动的观念对所有的化学反应和物理性质作出机械论的解释，

① Boald Hoffman，“化学上的理论问题”，载*Chemistry and Engineering*, July, 29(1974).

抛弃一切神秘主义理论。……对后世的化学家起了很大的推动作用”[①]。拉瓦锡发现了氧，提出了燃烧氧化学说，他系统地批评了传统的化学理论，他用实验证明荷尔蒙特关于水可以变土是错的，他又用实验否证了波义耳关于金属燃烧时重量增加是由于吸收了容器外面的火微粒的论点。以后又在普利斯特列和卡文迪什的实验工作基础上，推翻燃素说，确立了氧化说。拉瓦锡的这些成就的取得，其中的一个关键性原因就是，他“抓住了一个极端重要的事实，要解释这个（即汞煅烧）和其它许多类似的实验以及普利斯特列和卡文迪什的实验，并不需要燃素说，臆造一种与其它物质在性质上根本不同的物体是不必要的。牛顿的力学建立在质量不变的假设上，这假说由于他的成功而证明不误。他还证明质量和重量虽然是两个不同的概念，但在实验中加以比较时，它们是精确地成比例的。拉瓦锡用经过称量的不可反驳的证据，证明物质虽然在一系列化学反应中改变状态，物质的量在每一反应之终与每一反应之始却是相同的。这个可以从重量上寻找出来”[②]。丹皮尔的这段话是什么意思呢？他是说，拉瓦锡与普利斯特列和卡文迪什不同，他抓住了两个基本概念：（1）化学反应中质量守恒（拉瓦锡是最先表述质量守恒定律的）；（2）化学理论与物理学理论的逻辑一致性。牛顿物理学中的质量决不可能是负的，化学理论不应与物理学理论相冲突，虽然化学反应中称得的化学反应物是重量，但拉瓦锡认为重量与质量等价，所以，燃素说假定燃素具有负重量，显然与牛顿物理学相冲突。这些观念还不能说是严格的化学理论，只能说是哲学观念，但正是这些哲学观念或者“理论框架”才促使拉瓦锡与化学中的传统理论决裂，因而独占鳌头，成了近代化学奠基者。

门捷列夫发现化学元素周期律的例子，可以进一步说明思想框架对创建化学理论的启发指导作用。门捷列夫自己说：“单是事实的收集，哪怕收集得非常广泛；单是事实的积累，哪怕积累得毫不遗漏，都还不能使你获得掌握科学的方法，不能向你提供进一步的保证，甚至还不能使你有权照科学这个名词的高级意义来把它叫做科学”。他在谈到发现周期律的过程时说：“人们曾经不止一次地问我：根据什么和从怎样的思想出发来发现周期律，并且坚决保卫它的？对于这个问题，我只能这样答复……我把自己的力量贡献给物质的研究时，曾经看出这种研究含有两个这样的特征或性质：质量，它占有空间并且表现在引力方面，而最清楚和最现实的是表现在重量上；特性，它表现在化学变化中，而最清楚地表现在化学元素的概念中，当一想到物质的时候，除了物质的原子的一切概念以外，对我来说，决不能避开两个问题：什么物质和多少物质，而这和化学元素的质量那个概念也正相符。……因此使我不由得产生了一种想法，以为在质量和化学元素中间必然有连系，因而物质的质量（虽然不是绝对的，而只是相对的）最后总表现在原子里，那么就应该找到在元素的性质和它们的原子量中间的函数关系。……因此我把元素和它们的原子量以及种种基本性质写在一张卡片上，就开始把性质相似的元素和相近的原子量排列成行。这样，我很快就得出了一条结论：元素的性质是随着它们的原子量而周期地变化的”[③]。这就是门捷列夫发现周期律的指导思想。门捷列夫在发现

---

① 亨利.M.莱斯特：《化学的历史背景》，商务印书馆，1982年，125页。

② W.C.丹皮尔：《科学史及其与哲学和宗教的关系》，商务印书馆，1979年，263页。

③ 门捷列夫：《化学原理》，转引自盛根玉、吴敬华：“门捷列夫方法论初探”，《华东师范大学学报》（自然科学版），1981年第1期。

周期律之前，就有了“元素性质和它们的原子量之间必然存在着内在联系和客观规律”的信念。这种信念是他去收集资料，进行繁复劳动的思想基础和基本框架。没有这个思想基础和基本框架，要想作出这样重大的发现是很难想象的。这种信念就是科学家的自然观和物质观，而这种自然观和物质观在一定条件下就转变为方法论，成为科学家本人从事科学研究的重要方法。

再如，量子化学的创始人之一的鲍林，他在研究晶体结构中，发展了他后来称为stochastic（源于希腊语，意为通过假设来推测真理的艺术）的方法，也就是“假设与推测”的方法。这种方法是基于他对物质的基本观念，即晶体的结构与性能之间有对应关系。他认为晶体的结构决定晶体的性质，于是他问道：“为什么不能用我所发展的对无机物晶体性质的理解去进而预言它们的结构呢？如果我预言某一结构，然后计算X射线图形，如果符合于观察的图形，我感到我就有权说这是正确的结构。”[①]鲍林后来又根据这种物质结构与性质辩证关系的认识运用于分子生物学研究，创造了分子模型方法[②]。

创立耗散结构理论，荣获1977年度诺贝尔化学奖的普利高津具有许多独创性的哲学见解。他强调需要从哲学思想上寻找自然科学研究的新的理论基础。他在“从存在到演化”的讲演中指出，西方经典物理学的时间观的根源在于一种“现实世界简单性”的信念，他们认为，“要了解宇宙，就只需要了解构成宇宙的砖瓦——基本粒子；懂得了生物大分子核酸、蛋白质，就可以理解生命，这曾是科学的基本信条。总之，一旦了解了组成整体的小单元的性质，就算掌握了整体。而社会学、生物学和哲学对于‘演化’的研究导致对过去和未来的认识，以及关于事物局部与整体关系的认识，是和上述的观点和信念不能协调的。物理学正处在结束‘现实世界简单性’信念的阶段，人们应当在各个单元的相互作用中了解整体。要了解在相当长的时间内，在宏观的尺度上组成整体的小单元怎样表现出一致的运动”[③]。他突破了传统的观念，形成了自己新的自然观，才使他独辟蹊径，开拓了化学和物理学研究的一个新天地。

化学史上的大量事例说明，化学家的化学成就总是与他的哲学思想和理论框架有密切的关系。化学史固然是化学实践和化学理论发展的历史，但同时也是化学思想和化学概念、化学方法发展演变的历史。化学哲学研究则要从考察这些历史发展中揭示其内在规律来，增进对化学知识的系统的哲学理解。因此，化学哲学与化学史两者不可分离，化学哲学离开了化学史，则化学哲学就成了空洞的思辩，成了无本之木，无源之水；化学史若离开化学哲学，则化学史研究往往是目光短浅的，或者是单纯的史料汇集，或者成了繁琐的考证。

本书许多篇幅是通过化学史实的考察，初步探讨了若干化学哲学问题。从波义耳算起，化学已有三百年的历史了，但对化学的反思还从来没有像今天这样地迫切需要。因为化学已进入了一个新的阶段，化学将向何处去？这个问题被尖锐地提到化学哲学工作的日程上。究竟什么是化学？化学过程的本质是什么？它与物理学关系又如何？等等问题需要我们加以回答。本书的若干章节对此作了探讨。这里需要补充的是，我们研究问题诚然根本上不是从定义出发，但研究一门学科或某个问题，首先应该给出某种规定性，

① “创造生涯——著名化学家鲍林自述”，《化学通报》1981年第7期，57页。
② 鲍林：“化学上还有许多未解决的问题”，见506页注①。
③ 普利高津：“从存在到演化”，《自然杂志》1980年第1期。

不了解它的对象和研究内容，我们就很难说算是已经认识了它。没有某种规定性，有时甚至难以着手研究。为了弄清化学究竟是什么？笔者以为，除了研究现状，看看今日化学家在研究些什么，关心哪些问题，然后从中得出应有的结论之外，还应该做更多的工作。因为今日化学家正在研究的问题固然是化学的内容，但今日还没有去研究去涉及的问题并不等于就不是化学的内容。所以，这里要解决的不但要注意到化学家目前正在研究的东西，而且更要注意到化学家应该研究什么和可以研究什么。当然，这需要时间。如果我们想到物理学上的革命——牛顿力学的建立，到化学上的革命——拉瓦锡氧化说的提出，其间相隔足有一百多年；如果从天文学由日心说取代地心说算起，那么，化学革命被延缓了的时间就达二、三个世纪之久。所以，我们不能苛求于化学。但这也使我们同时想到，当代物理学革命的成果正在向各个自然科学领域渗透，因而可以预期，突破传统化学、一个新的化学革命或许是指日可待了。正因如此，我们应该将眼光放远一点。事实上，今日化学在研究内容上与十九世纪的化学有着原则的区别，决不能继续固守对化学的原有认识了。今日的化学已经越出了原子的界限。早在1908年，诺贝尔奖金委员会对卢瑟福关于放射性物质蜕变领域中的开创性研究作了如下报道："核裂变理论和基于这一理论的一些实验结果，已导致对化学的一些基本概念的崭新的和更加广泛的解释。在十九世纪，原子和元素代表化学分解过程的最终单位，因而这也是实验研究的限度。至于超越这一限度所存在的一些问题，都是模糊的和得不到结果的。这一长而无法越过的边界障碍，现在已被排除，至少在理论上已经不存在了。元素永远不变的定律，难于再保持下去了，这也如同以前分子不变论被抛弃一样；原子的结构和支配结构的一些规律，现在能够用精确测量的科学方法加以研究。迄今所获得的这些结果，不仅本身有很大的重要性，而且也许对将来的研究开辟多种可能的途径更加重要"[1]。当时卢瑟福曾被人提名授予物理学奖，但在物理学和化学两个诺贝尔奖金委员会联合举行的会议上展开了争论，最后认定，考虑到卢瑟福的工作对化学研究有根本的重要性，授予他化学奖更为合适。既然卢瑟福的工作是化学工作，那么今天人们认为化学是分子科学显然是太窄了。

如果按照"化学是研究从基本粒子到生物大分子的各层次的粒子的质变的科学"的定义，从而把化学分为：（1）分子化学即研究分子质变的科学，即传统的化学；（2）原子化学即研究原子和原子核质变的化学，即放射化学和核化学；（3）基本粒子化学，奇异原子化学等，那么就有一系列问题需要解决。例如，我们目前所指的化学能、化学键就应该是分子能、分子键，于是就有了原子能、原子键，基本粒子能、基本粒子键等，也就是说，怎样构成一个自洽的逻辑体系呢？它们与物理学的关系又怎样处理呢？对于这一点，还需要研究、再研究。

有一种见解把化学理解为传统的实验和生产性的科学，认为化学是物理学的一个应用分支。他们往往用量子化学是量子力学在化学中的应用作例子来说明他们的观点。苏联凯德洛夫反驳这种观点说：被自己科学的神奇的成就所陶醉的物理学家总是喜欢断言，量子力学'整个地'和'没有一点余地地'将全部化学归结为物理学了。但是，这里我们以为应该更加仔细地从方法论的角度分析基本的量子概念形成的真实历史。著名的量子化

① 参见《科学与哲学》1981年第4、5期，132—133页。

学家A.赫曼已经开始进行这种分析。他的第一批结果是令人惊奇的。如果玻尔、索末菲、泡利和其他一些人对原子的电子结构的研究没有利用化学家们根据化学元素最简单的单原子和双原子反应所获得的那些最丰富和最广泛的材料，那么，单从物理学中是不可能产生量子数，特别是泡利不相容原理的概念的。我们且不说门捷列夫周期系在基本的量子概念的形成中所起的决定性作用。可以说，周期系在非常浓缩地编码形式中，集中了实验化学家们自古以来的实验所提供的大量经验材料。所以，量子理论是综合了物理学和化学知识而形成和发展的。而量子理论又实现了物理学和化学的理论综合……”①。量子化学创始人之一鲍林在《化学键的本质》第一版序中也说，“就量子力学对化学的贡献来说，其中只有一小部分是纯属量子力学的性质，例如，只是在少数情况下，薛定谔方程的精确求解才得出具有直接化学意义的结果，已经取得的进展主要还是得自基本上属于化学的论证，那就是指出一个简单的假设，从而通过与已有的化学资料作经验性的对比进行验证，然后再用来预测新的现象”②。的确，量子化学不仅是现代物理学的实验方法和理论不断深入化学领域的结果，而且也是化学自身逻辑发展的必然产物。因而，要从量子化学的诞生过程出发，把化学归结为物理学，显然是缺乏根据的。量子力学的若干原理运用于化学，推动化学的发展，正如化学中的某些理论概念促进物理学的发展一样，它们是相辅相成，共同促进的。

化学中的理论和实验的关系问题，也是化学哲学需要认真探讨的问题。有人曾认为，随着电子计算机的发展，将来化学实验就成为可有可无的东西了，或者只起到验证设计正确与否的手段作用。不用说，这里所指的化学自然是传统化学，用我们的话说是指经典化学（与经典物理学相对应的化学）。但是就是这样的化学是否以后就用不着实验了，有人也表示异疑，并认为实验是化学研究中的最基本方法。认为将来实验对化学成为可有可无的，当然只涉及分子设计、分子合成，至于对核化学（包括核的合成，或更深层次物质的合成，如果它们也属于化学研究的对象的话）研究需要实验并没有加以否定，理论这架货车总要有实验之马来拉动才行。在承认实验对化学必不可少的前提下，依然还有哲学问题需要探讨，例如实验和理论的关系问题。化学工作者是否单纯从实验开始，将实验结果进行概括归纳形成假设，然后用实验检验，最后上升为理论？还是另有途径提出并发展化学理论？应该说，任何化学家从事实验都是在一定理论指导下进行的，观察实验本身就渗透着理论。但这两者的具体关系又怎么样？这需要通过化学史上重大发现的案例分析，深入探讨才能得出一些较符合实际的结论。这对认识论和方法论都有重要意义。

对于若干现代化学分支学科进行哲学探讨，目的在于找出这些化学分支赖以成长的主干和根基，并从哲学的角度去认识它们的未来发展。这些分支学科，除了上述普遍的哲学问题之外，也还有它们本身所提出的认识论和方法论问题。例如，化学原是以定量的精确性出名的学科，到了量子化学却使用近似的计算方法，这种近似处理竟成了量子化学的主要手段。这种转变需要从认识论和方法论上加以说明；生物化学与耗散结构理论从事生命现象研究时，前者探讨生命的分子基础——蛋白质和核酸的功能，从而揭示

---

① 凯德洛夫，《物理学的方法论原理》（俄文版），第四章 第8节，1975年。

② 鲍林：《化学键的本质》，上海科学技术出版社，1966年。

生命的本质；后者从生物体作为一个开放系统，与外界进行物质和能量的交换而形成耗散结构去认识生命；前者着重从局部去认识整体，后者强调从整体去考虑。这就要求阐明整体和局部究竟是什么关系？普利高津在谈到整体和局部的关系时说过，“实际上，直到现在我们也还不知道这个整体的统一是如何建立的，仍然需要人们继续作出努力”，他批评了“现实世界简单性”的信念并指出：“西方科学和中国文化对整体性，协和性理解的很好的结合，这将导致新的自然哲学和自然观”。很显然，研究现代化学分支学科的哲学问题，不但将为本分支学科的发展打下哲学基础，而且将为哲学一般理论问题的研究作出贡献。

就是十九世纪的化学理论，像门捷列夫化学元素周期律，由于核素和基本粒子研究的发展，提出了新的哲学问题，特别是它的方法论的启示作用。元素具有周期性是由原子核外的电子的行为所决定，表明原子具有结构。根据元素周期性与其内部结构的关系去研究基本粒子的结构，展示了元素周期律焕发出新的方法论光彩。

化学哲学研究的内容是丰富的，是有广泛前景的。它除了丰富一般的哲学、一般的自然科学哲学内容之外，还将为化学科学自身打哲学基础。具体地说，它可以从三个层次上同时展开：第一，从丰富的化学材料中探讨一般的哲学问题，例如，辩证法的规律，尤其是量变质变规律，以及运动形式和其它哲学范畴探索；第二，通过化学发展规律、化学元素的发现和化学理论的建立过程的深入剖析，可以从中探寻整个自然科学的发展规律，科学发现的逻辑和方法论，以及科学认识论和科学方法论的有关问题；第三，为化学科学自身提供哲学基础。化学科学正在突飞猛进地发展着，需要不断扩展新思路、新方法、化学哲学研究可以配合化学家一起去摸索去总结，为化学研究奠定认识论和方法论基础，例如，探讨化学过程的本质、化学理论、概念的认识论基础和化学发展的方法论等等问题。自然辩证法研究进入具体学科领域，深入探讨该门学科中的认识论和方法论问题，这是自然辩证法研究有活力的表现，也是自然辩证法发展的必由之路。

当然，本书中涉及的种种观点，尽管经过作者们的反复思索、认真钻研后写成，但毕竟是一个新的尝试，其中有的还未提到应有的高度，有的在深度上也还嫌不足，所以，都还需要进一步作出探索。有的问题本书尚未涉及，例如，化学的世界图景，化学史分期的方法论问题，化学理论、概念的认识论基础，化学体系问题，以及若干化学新领域中的哲学问题。至于随着化学科学的日新月异发展，定会有新的哲学问题出现，需要我们去研究、去探索，那就更不待言了。

化学哲学基础研究有许多工作可做。有志于这方面探索的人们一定可以做出许多有意义的成果。

金吾伦

六　科学技术和社会主义现代化建设

在我们全党全国开创社会主义现代化建设新局面的新时期，学习马克思关于科学技术社会作用的理论并把它提到现代的水平，来指导解决今天无产阶级和广大人民面临的理论和实践问题是十分重要的。特别是关于科学技术的社会作用的丰富思想和精辟论断，对我们现在进行宏伟的社会主义现代化建设具有重大的指导意义。党的十二大虽然把科学技术提到了建设现代物质文明和社会主义精神文明的战略地位，但是，我们广大干部和全体人民还应当进一步深刻学习和理解马克思关于科学技术的光辉论述，更加自觉地贯彻执行十二大确定的战略方针，真正把科学技术作为开创社会主义现代化建设新局面的一个法宝抓起来，运用好。

马克思关于科学技术社会作用的基本思想

重视科学技术对社会历史发展的巨大推动作用，依靠科学技术搞社会主义和共产主义建设，这是马克思主义整个理论学说的重要内容之一，是马克思、恩格斯确定的一个基本原则。人们都记得，恩格斯在为马克思所举行的葬仪上发表的著名讲话，他说："在马克思看来，科学是一种在历史上起推动作用的、革命的力量。任何一门理论科学中的每一个新发现，即使它的实际应用甚至还无法预见，都使马克思感到由衷喜悦，但是当有了立即会对工业、对一般历史发展产生革命影响的发现的时候，他的喜悦就完全不同了。"[①]在这样一篇简短精悍的悼词中，只能追述马克思一生中最主要最卓著的功勋，而把马克思关于自然科学的社会作用的思想同马克思的唯物史观和剩余价值学说相提并论，就足以表明它在马克思整个学说体系中占有多么重要的地位了。

科学技术的一个基本的主要的性质就是社会生产力。它凝结或渗透在劳动者、生产工具和劳动对象等生产力的诸要素中，推动生产力日新月异地变革，百倍千倍地增长，并且越来越成为人类征服和改造自然的直接现实的力量。对此，马克思和恩格斯有过深刻的分析和精辟的论述。早在1858年马克思写的《政治经济学批判大纲》中，就首次提出了自然科学是生产力的思想，明确指出："生产力里面也包括科学在内。"[②]又说："自然并没有制造出任何机器、机车、铁路、电报、自动纺棉机等等。它们都是人类工业底产物；自然的物质转变为由人类意志驾驭自然或人类在自然界里活动的器官。它们是由人类的手所创造的人类头脑底器官；都是物化的智力。"[③]1867年出版的巨著《资本论》，许多章节又进一步论述了科学技术的生产力性质及其对社会生产的推动作用。马克思指出："科学、巨大的自然力、社会的群众性劳动都体现在机器体系中。"[④]"机器生产的原则是把生产过程分解为各个组成阶段，并且应用力学、化学等等，总之就是应用自然科学来解决由此产生的问题。这个原则到处都起着决定性的作用。"[⑤]这

---

① 《马克思恩格斯全集》第19卷，375页。

②、③ 转引自《马克思、恩格斯、列宁、斯大林论科学技术》，人民出版社，1979年，29、31、32页。

④、⑤ 《马克思恩格斯全集》第23卷，464、505页。

就是说，生产力的发展和进步实质上是科学技术的发展和进步，科学技术是生产力发展程度的标志，而生产力又影响和决定着社会结构面貌的变革。所以，科学技术也就成为推动社会前进的重要物质力量了。

同时，科学技术不仅是推动社会历史前进的物质力量，而且还是一种强大的精神力量。因为科学技术作为一种知识理论体系，它是人类对自然界本质和规律的正确反映，是人类理性与智慧的结晶。它同宗教迷信、愚昧无知以及形形色色的唯心论和形而上学是根本对立的，水火不相容的。自然科学的每一个重大发现，技术上的每一次重大革新和创造，都强烈地冲击着愚昧落后的意识形态，沉重打击了宗教迷信和唯心论、形而上学的种种谬论邪说。正象恩格斯所生动描绘的那样，“在科学的猛攻之下，一个又一个部队放下了武器，一个又一个城堡投降了，直到最后，自然界无限的领域都被科学所征服，而且没有给造物主留下一点立足之地。”①同时，“在自然科学中，由于它本身的发展，形而上学的观点已经成为不可能的了。”②不仅如此，科学技术还可以推动哲学的发展，给先进革命的世界观提供科学基础，巩固和扩大唯物论辩证法的思想阵地。伟大导师恩格斯曾经深刻地指出：“在从笛卡尔到黑格尔和从霍布斯到费尔巴哈这一长时期内，推动哲学家前进的，决不象他们所想象的那样，只是纯粹思想的力量。恰恰相反，真正推动他们前进的，主要是自然科学和工业的强大而日益迅速的进步，在唯物主义者那里，这已经是一目了然的了。”③又说：“甚至随着自然科学领域中每一个划时代的发现，唯物主义也必然要改变自己的形式。”④这就是说，科学技术具有彻底革命的性质，它不仅驱除腐朽落后的意识形态，而且也是哲学发展的强大动力，推动进步正确的世界观不断产生新的飞跃。整个科学技术象永不停息的洪流冲刷着全部精神世界，去污秽，展新容，打破传统，一新耳目，从而在人类社会的历史进程中掀起一次又一次思想解放的热潮。

科学技术既然是一种强大的生产力，又是一种特殊的精神武装，那么，它的主要社会功能就是推动生产方式和生产关系的变革，促进社会革命的到来。马克思认为，科学技术的发展首先必然要引起生产方式的变革，并以工场手工业生产方式转变为机器大工业生产方式的历史过程作了深刻说明。同时，由于生产方式的变革，还必然要进一步引起生产关系本身的革命。因为，马克思所创立的历史唯物论指出，生产力决定生产关系，生产关系一定要适合生产力的性质和水平。当突飞猛进的科学技术引起生产力急剧变革而发展到更高水平的时候，原来相适应的生产关系，必然要落后、陈旧、甚至要成为生产力进一步发展的桎梏。这样，由于新生产力的代表强烈要求和积极斗争，生产关系的变革就势不可免了，进而其它社会关系和上层建筑的革命也必然要到来。其结果，便是新生产关系以及与之相适应的新上层建筑的建立，人类社会也就由一种形态转变为另一种形态。这是社会历史随着科学技术发展而兴衰更替的基本规律，封建社会代替奴隶社会是这样，资本主义社会代替封建社会也是这样，社会主义社会代替资本主义社会必然还是这样，只是随着历史条件的不同和科学技术的发展特点，革命的形式和持续时间不同而已。正是基于这种历史发展的基本规律，马克思才“把科学技术看成是最高意义上的革

①、②　《自然辩证法》，人民出版社，1971年，179，8页。

③　《马克思恩格斯全集》第21卷，318页。

④　《马克思恩格斯全集》第4卷，224—241页。

命力量。”[1] 并且在谈到欧洲1848年的革命经验时指出：“这个社会革命并不是1848年发明出来的新东西。蒸汽、电力和自动纺机甚至是比巴尔贝斯、拉斯拜尔和布朗基诸位公民更危险万分的革命家。”[2] 这是对科学技术的卓越历史作用所作的精辟而形象的概括，它充分肯定了科学技术在摧毁腐朽制度，变革生产关系，推动社会发展上的伟大历史作用。

“十月革命”以后，列宁面对苏联恢复和发展经济的困难以及现代科学技术对资本主义世界的深刻影响，继承和发展了马克思的关于科学技术社会作用的思想，在领导苏联人民进行社会主义和共产主义建设过程中，极端重视科学技术的伟大革命作用。他反复强调：“必须在现代最新科学成就的基础上恢复工业和农业”[3]。“只有当国家实现了电气化，为工业、农业和运输业打下了现代大工业的技术基础的时候，我们才能彻底取得胜利。”[4] 并亲自领导苏联人民制订了全国电气化的规划，高兴地称它是布尔什维克的“第二个党纲”，深刻指出：“蒸汽时代是资产阶级的时代，电气时代是社会主义的时代”[5]。“共产主义就是苏维埃政权加全国电气化。”[6] 由此可见，无产阶级的导师们无论是创立自己的革命理论学说的时候，还是在进行社会主义和共产主义的伟大实践过程中，历来是高度重视科学技术的卓越作用和战略地位的，并把它看成是引起社会变革的有力杠杆。这是由科学技术的基本性质和社会功能必然得出的结论。

总之，马克思关于科学技术是社会发展动力的思想，关于科学技术是生产力的思想，关于科学技术解放思想、促进世界观转变的思想，关于科学技术改变生产关系、引起社会革命的思想，等等，是马克思主义宝库中的重要组成部分，是指导被压迫民族、被剥削人民争取解放的思想武器，也是进行社会主义和共产主义建设的指导原则。今天，党中央重视科学技术，把科学技术列为发展国民经济的战略重点，作为建设社会主义精神文明的重要内容，这是完全正确的，十分英明的。我们要深刻领会它的重大理论意义和实践意义，更加积极自觉地实践马克思主义这一基本原则。

三次技术革命的经验证明了科学技术的伟大力量

马克思把科学技术看成“历史的有力杠杆”，看成伟大彻底的“革命家”，这一点也不过分。他是在总结第一次技术革命的经验的基础上得出这一结论的，又为第二次、第三次技术革命的历史经验所证实。为此，我们不能不简要回顾一下三次技术革命的历史概况。

第一次技术革命，开始于十八世纪六十年代，其主要标志是蒸汽机的广泛应用。它是牛顿力学和热学结出的一个硕果。

人们都知道，近代新兴资产阶级，一方面发展自己的工商业需要科学，另一方面反对封建教会思想统治也需要科学。所以，代表新兴资产阶级的哲学家、近代实验科学的

---

① 《马克思恩格斯全集》第19卷，372页。
② 《马克思恩格斯全集》第12卷，8页。
③ 《列宁选集》第4卷，350页。
④ 同上，第31卷，468—469页。
⑤ 同上，第30卷，303页。
⑥ 同上，第31卷，468—469页。

始祖弗兰西斯·培根提出一个著名口号："知识就是力量。"在这种社会背景条件下，以力学为中心的实验科学得到了迅猛发展。到十七世纪下半叶，在伽利略和刻卜勒研究成果的基础上，英国物理学家牛顿进一步作了理论的总结。他经过二十多年的实验研究和数学计算，在1687年完成了《自然哲学的数学原理》这本巨著。在这部著作中系统阐述了力学的三个基本定律和万有引力定律，从而建立起一个完整的力学理论体系。同时，为了研究力学和天文学，牛顿还发明了微积分（莱布尼茨也独立发明了微积分）。这样，他就把过去认为是截然无关的地球上的物体运动规律和天体的运动规律概括在一个严密统一的理论之中，实现了物理学以及人类认识自然的历史的第一次理论大综合。牛顿力学是整个物理学和天文学的基础，也是现代一切机械、土木建筑、交通运输等工程技术的理论基础。这一伟大成就，给第一次技术革命作好了理论上的准备，并使机械论的自然观取得了统治地位。

这次技术革命，第一个"火花"是纺织机的改革。1733年英国的纺织工人约翰·凯伊发明了"飞梭"，使织布机效率提高很多倍。从此纺纱就跟不上需要了，于是1764年哈格里夫斯又发明了"珍妮纺纱机"，提高效率八倍。这时高效率的纺织机有了，靠什么力量来带动这些新机器呢？动力问题就尖锐起来，于是人们又在寻找高效率的动力机械。另外，早已发明的用煤炼铁的新技术，也促使许多人来研究动力机械。这样，到1712年，苏格兰的铁匠纽可门就搞成了蒸汽机。这是一次很有意义的突破，使热能转变成为机械能。但是纽可门的蒸汽机耗煤量大，效率低，不能推广，只能在煤矿使用。到十八世纪六十年代，英国格拉斯哥大学的修理工瓦特，在多次修理纽可门蒸汽机时，发现大的蒸汽机比小的效率高很多。他经过反复深入地学习研究热学理论，就决定把冷凝这道工序不在汽缸内进行，而让与汽缸脱离的冷凝器来完成。同时，又利用加工炮筒的技术解决了汽缸、活塞的精密加工问题，于是在1769年瓦特的蒸汽机就诞生了。效率提高五倍，耗煤量减少四分之三。这样，蒸汽机就可以普遍推广使用了，一系列新机器的动力问题都解决了。因此，它大大推动了纺织、采矿、冶炼、机械加工等工业的迅猛发展。同时，随着蒸汽机的广泛使用，1807年又发明了轮船，1814年发明了火车，使交通运输业也发生了根本变革。并且，很快传到了各个国家，使人类进入了"蒸汽时代"。这次技术革命的后果，正如1848年《共产党宣言》中所说的："资产阶级在它不到一百年的阶级统治中所创造的生产力，比过去一切世代所创造的全部生产力还要多，还要大。"恩格斯在总结这一段历史经验时指出：科学和哲学结合的结果就是唯物主义、启蒙时代和法国的政治革命。科学和实践结合的结果就是英国的社会革命①。这就是第一次技术革命的基本概况。

第二次技术革命，发生在十九世纪七十年代。主要标志是电力的广泛应用。这是在科学技术全面发展的基础上，电磁学带来的一个光辉成果。

众所周知，经过十八世纪各方面准备，十九世纪成为科学全面发展的时期。其中最大的成就之一是能量守恒和转化定律的确立以及电磁学的重大突破。它给第二次技术革命准备了重要理论前提。

这次技术革命是直接来源于科学实验，即来源于对电磁现象的研究。1800年伏打发

① 《马克思恩格斯全集》第1卷，第666—667页。

明了电池，首次把化学能转变成电能。1820年，奥斯特发现了载流导线能够使磁针偏转，从而揭示了电和磁的内在联系。这两项成果大大推动了电磁学的研究和发展。当时，做过图书装订工的法拉第，深受奥斯特发现的启示。他想，既然电流能引起磁的现象，那么反过来，磁能不能引起电流呢？于是他就抓住这个新方向、新课题，进行变磁为电的艰苦研究，终于在1831年发现了电磁感应定律。应该说，奥斯特的发现包含了电动机的原理，法拉第的发现包含了发电机的原理。他们的研究成果，开辟了人类物质文明的新道路。随后，麦克斯韦又把全部电磁规律归结为一组数学方程式。并由这些方程式推论出自然界存在着电磁波，其传播速度同光速一样，而光不过是波长在一个很小范围内的一些特殊的电磁波。这样，法拉第、麦克斯韦的电磁理论不仅预言了电磁波的存在，而且揭示了光、电、磁现象的本质的统一性，完成了物理学理论的第三次大综合。电磁波存在的预言，在1888年由德国青年物理学家赫兹用实验证实。这一新发现预示了无线电通讯的可能性，并使无线电通讯技术从此迅速发展起来。

到十九世纪七十年代，由于能量守恒和转化定律的发现，特别是法拉第、麦克斯韦电磁理论的建立，打开了电力时代的大门，为人类开辟了一种新能源，因此一场新的技术革命就水到渠成了。1866年，号称近代德国科学技术之父的西门子，以电磁铁制成了实用的发电机，为电气工程的大发展开辟了广阔天地。接着在1875年前后，电动机也开始用于工业生产了，从而大大改变了动力设备和生产过程。到了八十年代，又解决了远距离输电问题，使工业生产摆脱了地方条件的限制。1879年发明了白炽电灯，城市开始有了现代化的照明。十九世纪末，美国又建立了大功率的发电厂，使电的应用更为普遍。到1904年前后，二极管和三极管相继诞生。这样，在原来已经广泛使用有线电报、电话的基础上，又增添了更为有力的无线电通讯工具。不久建立了广播电台，普及了收音机。到此，人类历史就跨进了以电用于动力、照明、通讯和生产的"电气时代"，社会生产又产生一次巨大飞跃。这就是第二次技术革命的概况。关于这次技术革命曾引起马克思的极大关注，他高瞻远瞩，充分估计到了电力所带来的社会革命的后果。据李卜克内西回忆说，当时"马克思嘲笑欧洲得胜的反动势力，它们幻想革命已经窒息，而没有想到自然科学正在准备一场新的革命。蒸汽大王在前一世纪中翻转了整个世界，现在它的统治已到末日，另外一种更大无比的革命力量——电力的火花将取而代之。这件事的后果是不可估计的。经济革命之后一定要跟着政治革命，因为后者是前者的表现而已。"① 十月社会主义革命的胜利，深刻证明了马克思的论断。

第三次技术革命，发生在本世纪四十年代，目前还在发展。主要标志是原子能、电子计算机和空间技术的广泛应用。这是现代物理学和各门技术科学综合发展的必然结果。

十九世纪末二十世纪初，由于发生了物理学的革命，自然科学进入现代科学阶段。当时，物理学领域接二连三地发现了很多新事实，猛烈冲击着物理学的经典理论，彻底推翻了原子是物质最小微粒、不可再分的传统观念。一些有远见、有才能、能够摆脱传统观念而面对现实的科学家，在这场物理学革命中大显身手，作出了杰出贡献。比如德国物理学家爱因斯坦创立了狭义相对论和广义相对论；著名科学家普朗克一反能量连续

---

① 《回忆马克思、恩格斯》，人民出版社，1973年，35页。

的传统观念，提出了量子假说，等等。随后，量子论又和原子结构理论相结合，产生了半经典半量子化的原子结构理论。1924至1926年间，青年物理学家德布罗意、海森堡、薛定谔等，又进一步提出了"物质波"概念，认为电子和一切物质粒子都和光一样具有波粒二象性，并很快建立起理论完整的量子力学体系，成功地揭示了微观物质世界的基本规律，为现代科学技术的发展开辟了道路，打下了基础，也为第三次技术革命作了思想上理论上的准备。

现代物理学革命的一个重大成果，是打破原子绝对不可再分、永远不变的古老观念，使人类对物质结构的认识从宏观世界跨进了原子的大门。1911年卢瑟福用α粒子轰击金属箔，证明原子中有原子核，遂即玻尔进一步提出核外电子绕核运动，象行星绕着太阳转那样。这是人类揭开原子内部秘密的第一步。1932年英国物理学家查德威克又用α粒子轰击轻原子核，发现了中子。这时人们就认识到，原子核是由质子和中子组成的。1938年底，哈恩和史特拉斯曼在德国发现用中子轰击铀，产生出原子量大约为铀的一半的元素钡。这样就发现了重原子核的裂变现象。这个重大发现很快引起世界各国的注意。许多科学家预测，在一个铀原子核裂变过程中可能产生几个中子，这些中子又可以引起其它铀原子裂变，即所谓"链式反应"。果然，几个月后，这个预测获得了证明。根据质量能量联系公式，重核裂变时所释放的能量比普通化学过程大一百万倍，这种新能就称为"原子能"。在第二次世界大战期间，美国建成了第一座原子反应堆，接着又制成了第一颗原子弹。这样便开始了人类利用原子能的新时代。

电子计算机的诞生也是经过长期理论和技术研究而出现的一次大飞跃。早在1854年，英国数学家布尔就创立了逻辑代数，为以后的计算机设计提供了数学工具。1936年，英国人图灵提出了通用计算机的理论模型，建立了算法理论。1943年，美籍匈牙利人冯·诺伊曼在以往计算机的基础上提出了制造电子计算机的设想。1945年由于军事上急需控制防空火力，第一台电子计算机就在美国应运而生了。这台电子计算机每秒计算只有五千次，虽然笨重、水平低，但在人类智力解放的道路上树立了一个新的里程碑。接着，1949年冯·诺伊曼又确立了计算机程序设计的理论基础，第一次用程序流程框图来描述计算机的运转过程。特别到五十年代以后，由于晶体管和集成电路的发明，以及软件系统的完善，电子计算机更得到了迅猛发展。

空间技术也是在近百年科学技术全面发展的基础上诞生的。早在本世纪初，俄国的齐奥尔科夫斯基，德国的贝尔特就曾设想利用火箭飞向行星世界。第二次世界大战期间，德国建立了火箭研究所，并试制和发射了重十三吨的V-2火箭。战后这个研究所被苏联占领，但研究所的一些人员则被美国控制。后来除了研究大型火箭，又研究了飞行器的结构、航天的轨道、遥控、卫星通讯、遥测、遥感等问题，同时为载人航天还研究了人在失重、超重、高空辐射情况下的生理过程。这样通过多种学科的综合研究与运用，1957年苏联就发射了第一颗人造地球卫星，从此开辟了人类征服宇宙空间的新纪元。

原子能的利用，电子计算机的诞生和空间技术的掌握，这是本世纪四十和五十年代科学技术的重大突破，它标志着人类第三次技术革命的开始，从而使近三十年来社会生产和人类生活面貌发生了日新月异、翻天覆地的变化。首先，原子能引起了动力革命，它比蒸汽、电力有更多的优越性。原子核裂变的能量比木材、煤炭、石油、天然气等化

学能大许多倍。至于可控热核反应，正在加紧研究，一旦突破还会给人类带来取之不尽、用之不竭的能量。目前，原子核能已经日益广泛的用在工、农业生产上，用在军事上，用在科学研究和社会生活各个方面，产生了巨大的影响。其次，电子计算机的发明和应用，不仅给人类带来了生产自动化，科学实验自动化，信息自动化，生产效率成百成千倍的增长，而且开辟了用机器代替人类脑力劳动的新时代。三是空间技术的发展，从根本上改变了人类认识和改造自然界的方式。现在，航天飞行器的种类不断增多，功能不断扩大，从发射气象卫星、资源卫星到送走了高能天文观测台；从载人航天飞行到登上月球，等等，大大改变了人类对自然的利用和改造。现在，人们利用卫星可以勘探矿藏、监视旱涝灾情、绘制地图、转播电视等，而且正在酝酿建立空间工业基地！总之，这次技术革命规模之大，速度之快，内容之丰富，影响之深远，都是历史上空前的。它不仅显著改变着生产方式、社会结构，使一些国家的三大差别逐渐缩小，而且改变着社会阶级状况，使工人阶级和资产阶级及其相互关系都发生了深刻变化。今后，它的社会效果还将进一步展现出来。特别是随着所谓的"科学知识爆炸"必然引起"生产力爆炸"，这种生产力爆炸的"冲击波"不能不从根本上摧毁私有制的堡垒，为共产主义的产生准备物质技术基础，并通过生产关系变革过渡到共产主义。

通过上述对三次技术革命的历史考察，我们从中得到什么结论和启示呢？

第一，科学技术是现代社会发展的一个决定性因素。自十八世纪六十年代到本世纪六十年代，短短两个世纪，连续发生了三次技术革命，把人类社会推进了三大步，即：蒸汽时代——电气时代——原子能时代，使人类社会的经济、政治、军事、文化、科学、教育等各个社会生活领域发生了空前未有的变化。试想人类漫长悠久的历史，哪一个世代能够象今天这样涌现出神话般的奇迹呢？这一切变化的决定性因素就是科学技术。这一点完全证明了马克思关于科学技术的社会作用的思想具有强大的生命力。

第二，科学技术与经济、社会必须协调发展。三次技术革命的中心发生了三次转移，第一次主要是在英国，第二次主要是在德国，第三次主要是在美国。它们虽然各有自己不同的模式，但是都遵循了科学技术和经济、社会协调发展的原则，就是说，它们都是依据本国的国情、资源、人力、物力、财力等条件，发展自己的优势科学技术和优势工业，合理调整自己的经济结构，使科学技术进步和经济增长、社会发展密切结合起来，从而由落后状态一跃而成为领先的地位。

第三，必须加强应用科学的研究，重视基础科学的研究。三次技术革命的机制和过程虽然不尽相同，但是在应用科学和基础科学相互结合的关系上，却表现了它们的共同特征。第一次技术革命是应用科学走在前面，然后是同基础科学相结合；而第二次技术革命则是基础科学走在前面，然后又同应用科学相结合；到第三次技术革命，应用科学和基础科学就相辅相成、难解难分了。基础科学是对自然界及其规律进行系统的、深入的探索和研究，为应用科学提供基础知识和普遍适用的新原理、新方法，或者开发新兴的应用科学；而应用科学则是一方面使基础科学的理论成果更快、更有效地应用到生产实践中去，开辟发展生产的新途径、新领域，另一方面又不断地从生产中提炼出新的课题，交给基础科学去研究，并给基础科学提供先进的技术手段和实验设备，以推动基础科学的进一步发展。三次技术革命的历程充分表明，基础科学和应用科学是相互作用、相互促进的辩证关系。所以，要加强应用科学的研究，重视基础科学的研究，二者不可

偏废任何一个方面。

第四，科学技术人员是新生产力的开拓者。三次技术革命的新理论 新技术、新发明、新创造，有的是专业科学家潜心研究的结果，有的是工人技术专家呕心沥血搞出来的。这些人都以他们的智力和体力从事创造性的艰苦劳动，揭开了自然界一个又一个奥秘，打开了科学的一个又一个宝库，把他们的汗水和心血凝结成光辉瑰丽的科学技术成果，进而物化为巨大的社会生产力。事实雄辩地说明，科学技术工作者是新生产力的创造者、开拓者。所以，决不能轻视或歧视科学技术人员，他们也是工人阶级的组成部分，而且是优秀的一部分。

总之，三次技术革命的历史给予我们很多有益的启示，它充分证明了马克思主义关于科学技术社会作用的理论是完全正确的，也说明了我们党重视科学技术，把科学技术提到前所未有的高度是十分英明的。

科学技术在社会主义现代化建设中的战略地位

马克思主义理论和历史的经验都告诉我们，搞社会主义现代化，振兴经济，必须依靠科学技术。

靠科学技术创造高度的物质文明。社会主义物质文明的重要标志是迅速增长的劳动生产率，自动化和科学化的生产过程，按人口平均不断提高的国民收入以及物质生活的明显改善，而这一切离开科学技术的进步和应用是不可想象的。尽人皆知，只有积极地自觉地采用最新的科学技术成果，大规模地有计划地进行技术改造，才能根本改变目前我国的经济落后状态，迅速提高劳动生产率，促进生产过程的自动化和科学化，把国民经济的人均收入和人民生活提高到一个新的水平。现在，有些发达国家的生产率由于采用了先进科学技术，已经达到很高的程度。比如，有的钢铁厂每人每年的平均钢产量已达750吨；有的汽车公司，按实际劳动时间计算，平均每四秒钟出厂一辆汽车；有的电子器材公司，按实际劳动时间计算，每十四秒钟出厂一台大型彩色电视机；有的国家一个农业劳动力，一年生产的农畜产品能养活六十多人，等等。如此高的劳动生产率靠增加劳动人数，延长劳动时间，扩大生产设备是不行的，必须靠先进科学技术武装工人的头脑，改革生产过程和工艺，变革劳动对象，实行科学化的管理，才能取得。再从价值上看，电子计算机的存储器，它所用的原料比相同重量的铁锅还便宜，可是通过科学的加工之后，其价格竟相当于相同重量的白金。难道这不说明，科学技术就是财富吗？要创造高度的现代化物质文明，离开科学技术就是一句空话，特别是在目前我国经济技术比较落后的条件下更是如此。

靠科学技术建设社会主义精神文明。搞现代化物质文明，离不开社会主义精神文明，因为社会主义精神文明能够促进物质文明，并保证它的正确发展方向。社会主义精神文明建设包括两个方面，一是教育、科学、文化知识的发达；二是人们思想、政治、道德水平的提高。而科学技术在这两个方面都起着十分重要的作用。首先，掌握丰富的科学技术知识才能树立共产主义的世界观。马克思主义的创始人建立这一世界观的时候，不仅吸取了人类思想的优秀成果，总结概括了工人运动的经验，而且总结概括了科学技术的一切成就。今天学习、掌握这一世界观，仍然需要有丰富的科学技术知识才能准确、牢固和深刻。否则，知其然不知其所以然，背条文，搬结论，是不能深刻领会和

运用这一科学、革命的世界观的。其次，掌握广博的科学技术知识才能破除迷信，克服狭隘落后的思想意识。事实表明，许多封建迷信、狭隘落后的思想，是和对自然现象的无知，缺乏必要的科学知识分不开的。比如，雷电击死人，本来是一种自然现象，但在有封建迷信思想的人看来，就是“天人报应”。假如他掌握了火花放电的科学知识，“天人报应”的鬼话也就没有立足之地了。所以，科学技术能够驱除人的愚昧，解放人的思想。帮助人们形成健康的思想观念。再其次，掌握丰富的科学技术知识还能开阔人的胸怀，树立高尚的情操。科学技术知识是科学家辛勤劳动的产物，他们的勤奋好学、热爱祖国、为真理而献身的高尚道德情操，常常随着科学技术知识的传播而深入人们的心灵，正象一提到放射性元素就想到居里夫人，一提到相对论就崇敬爱因斯坦一样。所以，掌握科学技术知识越多，一般说来人们的教养程度也就越高，精神境界也就越美，当然，例外也是有的。总而言之，社会主义的精神文明也必须要靠科学技术来建设，否则，一切都是不可能的。

靠科学技术实现干部的知识化、专业化。搞物质文明和精神文明建设，都必须要有一个重要条件，这就是广大干部的知识化和专业化。只有知识化、专业化的干部，才能使党、政、企业的决策科学化；只有知识化、专业化的干部，才能组织管理好物质文明和精神文明的建设。那种“外行领导内行”的时代已经成为过去，那种单凭经验、阅历、甚至“朴素的阶级感情”进行决策、管理、领导的方式，已经远远不能适应新时期、新任务的需要了。因此，干部的知识化、专业化，是一个战略性的问题。我们靠什么实现干部的知识化、专业化呢？当然还是靠科学技术这个法宝。科学技术知识是人类劳动和智慧发展的结晶，是客观事物本质和规律的理论总结。用它来武装干部的头脑，就能开阔干部的视野，提高干部的科学素养，增强干部认识和驾驭自然规律的能力，激发干部决策和管理复杂事物的智慧。所以，靠科学技术实现干部的知识化、专业化，首先必须组织干部学习，对干部进行有计划有步骤地培训；其次，是建立必要的规章制度，如干部考核制度等；其三，也是最根本的措施，即普及教育事业，大力发展各种类型的中、高等教育，提高人民的科学文化水平。这样，我们党的干部队伍就会面貌一新，同时后继有人，科学素养和决策、管理才能就会迅速提高，胜利地担负起四化建设的光荣使命。

总之，半个多世纪的实践表明，中国革命和建设的一切胜利，都是马克思主义在中国的胜利；中国革命和建设的一切失误和挫折，都是背离马克思主义的结果，我们要牢牢记取这个经验教训。马克思主义关于科学技术社会作用的思想象光芒万丈的灯塔，照耀着我们在新的历史时期去创造物质文明和社会主义精神文明，必将取得空前伟大的胜利。

唐叙庆　张长城

附　录

(一) 中国的化学哲学活动

解放前，我国的革命前辈在战争年代就开始了自然辩证法的学习和宣传，但是在化学哲学方面可以说还是空白。在解放后的35年（1949—1984），在党的领导和广大化学工作者及自然辩证法工作者的共同努力下，逐步取得了相当的进展，特别是在1978年以后进展较快。主要表现是：

（1）化学哲学的论文逐渐增多

1949年以后，我国党政的有关部门就积极宣传和组织广大学者、科学家学习了马克思主义和毛泽东思想。与此同时，科学和教育界的一部分知识分子也开始积极学习了《自然辩证法》和《反杜林论》等经典著作，并在此基础上结合化学科学撰写出一些有关化学哲学的文章，发表于报刊进行学术交流。1966年以前刊登这方面文章的杂志主要有《自然辩证法研究通讯》、《化学通报》、《科学通报》、《哲学研究》、《新建设》、《化学世界》及《红旗》等。此外，在各省主办的理论性学术刊物上也有时刊载一些有关的文章。《光明日报》和《文汇报》等报也发表过化学哲学的论文和译文。

1956年制订的全国自然辩证法研究规划中，也对化学哲学的研究做出了规划。此后，化学哲学的科研、教学、交流工作有了进一步开展，但是步子还不够大。尽管如此，这也还是一个很有意义的开端。此外，当时还曾对一些化学中的重大理论问题（如共振论问题），在北京等地开展过讨论。

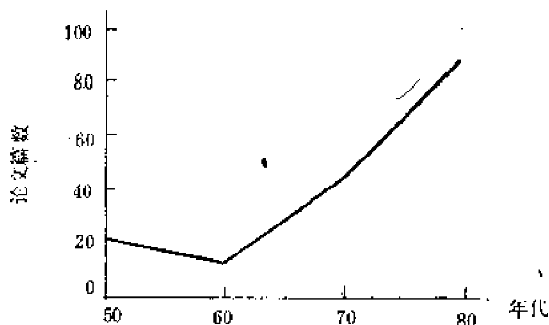
七十年代以来，特别是十一届三中全会以来，《化学通报》、《哲学研究》等相继复刊，并先后创办了《自然辩证法通讯》、《方法》、《科学与哲学》、《自然科学哲学问题丛刊》、《自然信息》、《科学、技术与辩证法》和《自然辩证法研究》等杂志。另外，在部分省的综合性学术刊物和高等院校的学报上，以及在《光明日报》、《文汇

部分报刊和全国性学术会议发表的化学哲学论文篇数统计表

报刊、会议名称	五十年代	六十年代	七十年代	1980.1—1984.4
化学通报	13	2	30	4
自然辩证法研究通讯	7	4	—	—
自然辩证法通讯	—	—	1	3
自然辩证法报	—	—	9	33
光明日报	1	3	2	2
化学辩证法学术会议	—	—	—	47
合　计	21	9	42	89

报》和《自然辩证法报》上，都登载了一些化学哲学的文章。

从上页的表和下图可以看出我国化学哲学研究的发展概况。



可以看出，从文章的数量来看，八十年代初比五十年代已有明显增多，大约增长四倍。论文数量的增加，反映出有更多的化学、化工工作者和自然辩证法工作者正在从事这方面的研究，并取得了相当的成果。特别是还有不少老一辈的化学家长期关注着化学哲学的发展，并亲自带头写文章，推动了化学哲学的研究工作，并为化学工作者同自然辩证法工作者的联盟做了贡献。

（2）化学哲学研究的广度和深度上的不断进展

在五十和六十年代的文章中，确实提出了不少重要的化学哲学问题，但是尚未深入展开讨论。从七十年代以来，特别是三中全会以后，化学哲学从多方面展开了研究。大体上可以分为以下几个方面：

第一，化学的认识论问题。这个问题一直受到重视。发表的文章有1955年《哲学研究》第4期的"辩证唯物主义认识论与化学"（孙承谔、戴乾圜），1957年《化学通报》第9期的"原子-分子理论的历史发展"（张子高），1978年7月19日《光明日报》的"从元素周期系认识理论与实践的关系"（解强、金日光），1975年《化学通报》第2期的"人对苯分子结构的认识"（杨频），1982年第22期《自然辩证法通讯》的"道尔顿原子论和认识论"（王绪朗）等。

第二，化学中的方法论问题。《自然辩证法研究通讯》1966年第3期刊登的"现代分子结构理论的三大流派及其发展中的某些方法论"（徐光宪）一文，是我国化学哲学中较早明确提出方法论的文章。到1981年召开全国首届化学辩证法学术会议时，化学方法论已成为大家感兴趣的主要问题之一。这是一个对于化学研究有着密切关系的重要课题。化学方法论应当以化学的科学研究为基础，立足于化学，然后运用唯物辩证法的观点进行分析概括。目前人们是从三个方面进行工作的：①分析科学史上的经验教训，包括一些重大的化学问题和特定时期方法上的问题，把它们提高到方法论上来认识；②对著名化学家的研究方法进行研究总结；③寻找新兴学科与化学的结合点，提出新的化学方法论问题。总之，必须立足于化学实际，在辩证思维的指导下，深入学习化学史和现代化学，不断更新知识，从中总结和概括出有关的方法论问题。

第三，化学中的辩证内容。这方面的论文有一定数量。例如1964年发表的一篇文章，就从化学元素、化合物及化学反应等三个方面论述了化学运动矛盾的特点。1983年人民出版社出版的《自然辩证法文集》中收入的"结构化学中若干辩证法问题"（卢嘉锡）一文，则从辩证法的角度对结构化学中的结构与性能、研究手段与思维方法、精确与毛估、局域与离域等辩证关系进行了论述，很富有启发性。

特别是人民教育出版社出版的《化学辩证法问题初探》（廖正衡、盛根玉，1980年）和广东人民出版社出版的《化学运动的辩证发展》（江琳才，1981年），是两本关

于化学辩证法的专业书籍，尽管篇幅不大，内容尚欠丰富或完善，但不失为是一良好开端。至于这方面的译作，本文暂不作评介。

第四，化学中的一些理论问题。过去在我国讨论最多的有两个问题，一个是共振论问题，一个是热寂论问题。

学术界对于共振论的讨论和评价有一个认识过程，应当以历史唯物主义的态度加以分析和认识。由于五十年代我国所处的历史条件，当时对共振论的评价是否定多于肯定。在六十年代所发表的文章中则给予了比较合理的评价，在基本肯定的同时也指出了问题的所在。七十年代后期又再度提出了对共振论的评价问题。近些年来约有三种不同的意见。一种意见认为，共振论有肯定的一面，但也有唯心主义的因素；第二种意见是基本肯定，但作为理论尚有不足之处；第三种意见则是完全肯定，有的同志还从量子力学理论上做了论证。

从化学发展的实际情况看来，应当承认共振论在其提出后的二、三十年中曾对化学发展有过积极作用。只是在分子轨道理论受到人们重视以后，共振论才在化学上被更合理的理论所代替。回顾和再评价共振论的目的是在于通过对化学史上理论的评价，以便能够从认识论和方法论等方面获得新认识，活跃思想，促进当前现实的化学研究工作。

对于热寂论的讨论，主要是联系到对于热力学第二定律的认识进行的。恩格斯在《自然辩证法》中早已批判过热寂论的错误，这本来已经是很清楚的问题了。五十年代初，我国化学工作者开始广泛学习唯物辩证法时，又曾写过一些文章批判热寂论。这是很自然的事情。但是在七十年代初，在极左思潮的影响下，有人却以批判热寂论为名来批判热力学第二定律，从而挑起了一场新的争论。当时陆续发表了十多篇论文，大多数文章都论证了热力学第二定律是无罪的，并且正确地批判了热寂论。最后，在1977年第6期的《化学通报》上，由编辑部对这一时期的讨论作了总结，结束了这场争论。

通过对化学中理论问题的哲学评价，有三个值得我们思考的问题。其一，如何进行科学抽象？其二，对自然科学的理论（包括化学中的理论）应当如何评价？其三，在评价化学理论时哲学应当起什么作用？

第五，化学和化工中的应用辩证法问题。如何自觉地把辩证法运用到科学研究和化工生产中去，是一个重要问题。这方面的文章数量并不很多。在指导科学研究方面，六十年代的文章有《文汇报》的“学习用毛泽东思想指导科学研究”（陈念贻，1965年）和《红旗》的“毛泽东思想是研究自然科学的锐利武器”（唐敖庆，1965年）和《自然辩证法研究通讯》的“用唯物辩证法指导分子结构理论研究”（徐光宪，1965年）等。七十年代的文章有《化学通报》的“用毛主席哲学思想指导研究离子极化定量理论”（温元凯等，1976年），文中提到多年来国外有许多人尝试对离子极化进行定量研究，但效果均不甚满意。而作者运用分析矛盾，抓主要矛盾的辩证方法，获得了一种定量计算的较好方法，提出了离子极化的初步定量理论，并运用它探求和解决了几个化学实际的规律性问题。又如，1983年全国化学化工辩证法学术讨论会上提交的论文“唯物辩证法指导我进行科学研究”（赵慕愚），总结了作者多年运用辩证法指导科学研究取得成果的体会。文中提到他自己提出了“一套比较系统的有关相图中紧邻相区及其边界关系的理论，初步得到了国内外专家的一些好评。这个理论可以系统地阐明各类相图中紧邻相区及其边界的关系，可以概括国际上有关这方面的所有经验规律和一般法则。并且在热力

学数据充分的条件下，根据这个理论可以计算相图。特别是现在国际上还没有看到垂直截面图。通过这种计算，可以指导许多重要部门的生产和科学实验研究。因此，这个理论是有一定实用价值的。”这类工作给人以深刻启示。

第六，关于对恩格斯《自然辩证法》原著的深入学习问题。华中工学院和东北师范大学等许多高等学校的化学工作者都成立了《自然辩证法》学习小组，并发表了论文。例如《化学通报》先后发表的“物质内部结构中的矛盾运动”（1975年第3期）和“恩格斯奠定了化学辩证法的基础”（1983年第7期）等。

第七，介绍国外化学哲学的情况。这方面的文章大体有两类。一类是翻译国外有关文章和著作。五十年代已做过不少工作，主要是介绍了苏联、罗马尼亚、捷克斯洛伐克、法国、英国及日本等国的一些论文、著作和学术活动。六十年代较少。1976年以后介绍西方科学哲学的情况较多，但涉及化学哲学的文章甚少。

第二类情况是综合介绍。1980年第12期《化学通报》介绍了西方化学哲学情况（金吾伦、邢润川），1982年第1期《化学通报》介绍了苏联化学哲学的情况（张嘉同）。相比之下，苏联对化学哲学的研究是比较多的。这与西方国家忽视化学哲学问题的研究有关。这一点从美国1976年《化学学会评论》上D.W.绍贝尔德“关于化学哲学的一些考虑”一文中可以得到佐证。该文对于美国科学哲学集中在物理学方面提出了不同见解，认为应当注意化学哲学问题的研究。

（3）化学哲学的专业队伍正在成长

在解放后的前十年中，仅有少数自然辩证法工作者和化学工作者从事化学哲学的学术活动，还谈不上有一支队伍。如果说有，也是一支很小的队伍。而近年来，已逐渐形成了一支兼职和专职相结合的化学哲学工作者的队伍。这方面的学术活动也比较活跃。自从1977年12月全国自然辩证法规划会议在北京召开以来，根据化学哲学方面的规划于1979年5月在中国自然辩证法研究会（筹）中成立了化学专业筹备小组，提出要贯彻“百家争鸣”的方针，以解放思想，活跃学术气氛；强调应坚持四项基本原则，坚持实践是检验真理的唯一标准；并明确专业组的任务是：探讨本学科提出的新问题，研究本学科的新成就，把握本学科的新动向，介绍国内外本学科的最新发展情况，就有关哲学问题交换意见，互通情报，加强交流，积极开展学术活动。并于同年5月25日召开了第一次专题讨论会，讨论了“化学在自然科学中的地位和作用”等问题。1981年在长沙举行了首届全国化学辩证法学术会议，就一些重要理论课题进行了热烈讨论，提交的论文的水平有所提高。这次会议促进了化学工作者和化学哲学工作者的联系，扩大了专职和兼职研究的队伍。同年在苏州举行的全国首次化学史学术会议上，专门成立了一个化学哲学小组，讨论了化学发展中的哲学问题。1982年在成都召开的第二届全国化学史学术会议上，化学哲学小组又有进一步的加强和扩展。1983年在长春举行了第二次全国化学化工辩证法学术会议，受到了著名化学家卢嘉锡、唐敖庆、徐光宪和化工部副部长杨光启等同志的关注和支持。这次会议上反映出来的化学哲学研究成果，在数量和质量方面又有提高，特别是密切了化学、化工和化学哲学工作者三方面的结合，促进了化学和化工专业的联系，进一步明确了化学哲学的研究方向，鼓舞了大家从事化学哲学研究的积极性。会上还正式成立了中国自然辩证法研究会化学、化工专业组。通过这一系列学术活动，扩大了化学哲学的研究队伍。

应当提到的是，近年来在全国各地陆续培养了一批自然辩证法的研究生，其中有一部分是从事化学哲学研究工作的。这部分人才的成长，使化学哲学队伍的素质有了新的提高。这是一支基础较好的后继梯队，成了我国现代化学哲学研究行列中的有生力量。

总之，随着十一届三中全会以后出现的新形势，化学哲学界逐步开创了新的局面。其主要表现是：关心这一领域研究的人不断增多，专业队伍不断扩大，论文的数量迅速增加，研究水平逐步提高，学术活动空前活跃，学术合作日益加强。一些比较重要的化学哲学著作正在撰写，例如，《中国大百科全书·哲学卷》中自然辩证法部分的有关化学哲学条目和《自然辩证法百科全书》中的化学哲学部分，等等。可见，我国的化学哲学研究有着一个广阔的发展前景，期待着更多的有志、有识之士为之努力奋斗，更好地为我国的精神文明和物质文明做出贡献。

张　家　治

（二）国外的化学哲学活动

近年来，随着科学哲学和化学哲学研究的深入，国外化学哲学活动也日渐活跃。化学哲学的专题讨论会屡有举行，专著和论文的数量不断增多。化学哲学活动活跃起来的一个因素，是原先学习化学学科的不少科学哲学家，从剖析化学的历史和现状入手，揭示科学发现和科学发展的规律和模式，在这一过程中对化学学科的特点和方法进行反思，从而也揭示了化学理论发现和化学学科自身发展的规律。苏联的凯德洛夫院士和美国芝加哥大学的阿伦·德巴斯，就是其中突出的例子。

然而，化学哲学研究比起物理学哲学和生物学哲学的研究来，规模仍然较小，系统性也嫌不够。但是从发展的趋势看来，化学哲学研究的前景是广阔的。这是由化学学科自身的重要性和特点所决定的。

这里将国外近年来有关化学哲学的活动作一简要的介绍，以供国内开展化学哲学研究的参考。本文介绍侧重于西方的情况，至于苏联有关化学哲学的专著和论文则另有专文。

学　术　会　议

（1）民主德国学者讨论化学哲学问题

几年来，柏林洪堡大学马列主义哲学系自然科学、技术科学和数学问题方面的代表，和民主德国科学院中央哲学研究所科学发展哲学问题方面的代表，就哲学和自然科学的关系问题，联合在屈隆斯波恩召开讨论会。在过去四年里，会议是在“关于发展的科学——科学的发展”这一主题下举行的。从1979年以来，每年讨论一次，其中涉及了许多化学哲学问题。

1980年在题为“结构与进化”的年会上，W.哈贝狄茨在报告中探讨了“化学在今天究竟是什么”这一难题。他阐明了今天的化学在内容上同十九世纪的化学有原则性的区别。哈贝狄茨认为，现在没有充分认识物理、化学和数学之间的新型关系。化学大多被理解为传统实验和生产性的科学。他指出，物理学和化学（包括数学在内）正在接近，并在各方面融化为不同的新学科。这种新情况也影响到哲学领域，因为这涉及到物质运动形式的划分问题。

H.-J.比特里希探讨了什么是化学理论的问题。与会者就问题作了讨论，认为人们对“究竟什么是化学”这个问题至今并没有弄清楚。有人指出，化学的特殊性表现在用大技术实行物质的转化上。同时与会者也对“还原”和“还原论”这些概念的规定性作了哲学上的探讨。

P.J.普拉特提出了关于化学过程结构类型的思想。为了适应今天迅速发展的、采用电子计算机的化学合成计划，他认为应该对化学结构理论作统一的解释。他指出，图论有可能把分子结构和化学反应结构翻译成计算机语言。

1981年年会讨论了“哲学和专门科学中发展理论的进展”这一课题。与会者就各个发展问题进行了讨论。U.勒泽贝格认为，1913年和1927年间发生的从古典力学向非相对论量子力学的转变，在哲学上只能被理解为是一个发展过程。按他的看法，在其它数学科学中，理论发展也包括表述结构。P.默比乌斯对微观领域中的不可逆性发表了看法。H.乌布利希研究了物理学中理论的发展。他们都强调指出，发展的思想即使在物理学中也有一定的地位。

H.-J.比特利希明确指出，这一点也适用于化学。他同时指出，化学产品和化学科学领域之间关系的发展，是作为进化化学的化学和无限多种多样分子存在在进化中所起的作用的因素。比特利希强调了化学在科学地理解进化问题上的重要意义①。

（2）苏联学者讨论化学哲学问题

1978年，苏联在新西伯利亚科学城举行了化学方法论和化学哲学讨论会。会议的题目是“在科学技术革命时代化学和化学成就的哲学总结”，就化学中具有哲学意义的问题进行了广泛的讨论。会议主持者巴列思可夫说到，现在是化学发展的重要时期，提出了重要的方法论问题，这些问题的解决有赖于化学各部门的切实发展。属于这类问题的有：确定化学中的概念的意义和内容，以及在现代化学各部门中广泛应用的量子化学方法的可靠性和界限。他着重指出，只有在大批专家的参加下，才有可能对化学方法论问题进行有成效的研究。瓦里可夫指出，化学的发展要求解决一系列方法论问题，如确定化学研究的对象和客体，研究化学现象和过程的数学化，其它研究方法在化学领域中的运用及其特点，等等，可惜的是，目前文献中却很少注意到这类问题。

塔里拉捷夫考察了化学在自然科学体系中的地位。他提出要把科学分类问题建立在区分物质运动的基本形式和物质世界的基本规律的基础上。他认为，现代科学的分类，应当考虑自然科学的发展，应当反映科学的分化与整体化的深化。因为这些都会导致科学新门类的产生以及每门学科中新的独立分支的出现。科学的分化反映着运动的现实负荷体多样性的联系，科学的整体化则反映着关于物质世界的知识的深化。这种知识的深化是建立在自然现象规律性的互相联系和互相依赖的思想基础之上的。

卡里克文柯在“理论和实践在化学发展中互相联系和互相作用”的论文中指出：现代化学和物质生产相互联系的一种形式是实验，无论是化学理论还是实践活动的发展都是以实验为基础的。现代化学和物质生产相互联系的第二种途径是科学的世界图景的一般理论概念和确定的世界观体系，这是人类各种实践活动的成就，人类社会活动的总和的反映和概括。

---

① 载民主德国《德国哲学杂志》1981年第12期，转引自《哲学译丛》1982年第4期。

萨玛拉耶夫探讨了化学催化理论发展的两个基本阶段：第一阶段主要是研究催化的基本形式，如多相催化、均相催化、酶催化等；第二阶段才致力于研究催化的本质问题。萨玛拉耶夫认为目前催化的本质问题还没有获得完全的解决，只有对化学变化的机制和物质结构进行详细的研究才能搞清催化的本质，而这个问题的解决，必须加强化学家、物理学家和生物学家的合作。

马林指出，在现代自然科学综合发展的条件下，物理学和化学更具有相互依赖的关系。他还指出，正是在各门科学之间的接触点上，能提出富有成果的假说，形成对人类关于世界知识的增长发生影响的科学概念。

布里施金在"量子化学的发展"论文中指出，量子化学给分子的结构和分子的性质提供了物理上的解释。在量子力学发展的第一阶段，用薛定谔方程十分满意地描述了分子的结构。后来出现了量子化学从稳定过程向不稳定过程的转变。量子化学成功地描绘了各种现象的动力学图景。现在，量子化学研究分子和能量的转变过程中出现的各种情况。这样一来，研究非平衡态的转变和向量子动力学的转变，就扩大了量子化学的范围，并扩大了量子化学研究的对象。

会议认为，目前对现代化学方法论和化学哲学问题的研究还不够，属于这方面的材料也很少发表。为了使化学各方面的方法论的研究得到有成效的发展，不仅要吸收化学家参加这项工作，同时还要吸收哲学家、物理学家和数学家参加这项工作[①]。

著　作

近年来，不少科学哲学家，对化学史上的一些重大发展和著名化学史的哲学思想及科学方法作了深入的考察，从中总结出科学发展和科学发现的模式，其中也涉及到不少化学哲学问题。这里着重介绍几本有代表性的著作。

（1）美国科学哲学家拉里·劳丹的《科学与假设》（西安大略大学科学哲学丛书，D. Reidel Publishing Company，1981）。该书是一本科学方法论史论文集，集中探讨了假设在自然科学中的地位以及表达假设-演绎结构的哲学尝试。其中有一节专门讨论了波义耳的工作和波义耳的科学方法论。他引证了波义耳的大量原始著作，说明波义耳把培根和笛卡儿的科学方法论融为一体，提出了一套前后一贯的、高于两者的科学方法论，并把它运用于物理学和化学的研究。波义耳从笛卡儿那里接受了哲学的启蒙，重视理性的作用，重视运用科学假设方法，同时又吸收了培根强调实验重要性的思想，使他能够抛弃经院哲学，批判四元素说和三要素说，建立了科学的元素概念，从而对化学的发展作出了贡献。

（2）美国堪萨斯州密苏里大学副教授乔治·盖耳的《科学理论——科学史、科学逻辑和科学哲学导论》（McGraw-Hill Book Company，1979）。该书中有一部分讨论拉瓦锡关于氧的发现和他的假说被承认。书中第二部分，也是全书第5章的标题为"拉瓦锡和氧"，其中指出了拉瓦锡发现氧的历史背景，他的个人特质和实验洞察力，着重阐述了拉瓦锡发现氧的前提是他有质量守恒观念和对当时物理学知识的深刻理解，从否定"燃素具有负重量"的错误观念入手，一步步走向氧的发现；该书的第三部分，

① 见《中国自然辩证法研究会通讯》1980年第19期。

也是全书的第9章题为"拉瓦锡假说的承认"中，探讨了一个理论被接受的基本要素。指出了拉瓦锡假说所以被接受，就在于他的理论的内在自洽性和与外部（特别是与物理学）的协调一致，终于使他推翻燃素说，新理论逐渐为科学界所承认。这一探讨，对于化学家如何建立理论，为了使自己的理论被公众承认应该注意哪些基本问题，或许具有一定的启发价值。

（3）美国科学史家和科学哲学家托马斯·库恩的《科学革命的结构》。该书引用了大量的化学史料，几乎每章中都有化学史上的实例。在该书的序言中所提到的几本参考书，其中就有迈兹热的《法国从十七世纪到十八世纪的化学系统》，《牛顿、斯塔尔、波尔哈夫和化学学说》等。他对拉瓦锡的燃烧理论取代燃素说，从而引起化学革命的历史材料的研究分析，可以说是他形成并阐发科学革命结构思想的主要材料之一。库恩在该书中引用的其它化学哲学和化学史著作还有：H.迈兹热的《拉瓦锡的物质哲学》，J.B.柯南特的《燃素说的衰亡：1775—1789年的化学革命》和《推翻燃素说》，亨利·盖拉克的《拉瓦锡——关键的一年：他在1772年作燃烧实验的背景和起源》，I.R.柏廷顿和道格拉斯·麦启的《燃素说的历史研究》，L.K.纳什的《道尔顿的化学原子理论》，还有他自己的专题研究论文："罗伯特·波义耳和十七世纪的结构化学"等。库恩正是基于对这些化学哲学和化学史实的研究，参照并总结了别人的研究成果并结合物理学史实的分析，才形成了自己特有的科学革命观点。

（4）科学哲学家拉卡托斯在他的《证伪和科学研究纲领方法论》一书中，在阐述了研究纲领的方法论规则：反面启发法（纲领的硬核）和正面启发法（纲领的保护带）以后，接着用普劳特的一切原子都是由氢原子构成的研究纲领来说明他的研究纲领的。

拉卡托斯详细分析了当时人们对普劳特假说所持的不同态度，追溯了普劳特假说提出后一个世纪的科学发展历程，证明用研究纲领方法论来评价理论比之其它方法论，例如波普尔的方法论要优越。拉卡托斯还引用普劳特本人的话说："本文作者极其踌躇地把此文交付发表，……他深信人们将会理解其意义，有人也会加以审查，以证实或推翻其结论。如果证明错了，则可通过审查而揭示新的事实，或更加确定老的事实；如果证明属实，则将给整个化学科学投以新颖而有意义的光辉"。拉卡托斯强调以科学哲学为指导去重建科学史。他的观点对化学史研究会有一定的启发作用。

（5）苏联著名哲学家Б.М.凯德洛夫于1970年出版了一本专著，题为《科学发现的显微剖析》，副题为"献给门捷列夫定律诞生一百周年"。这是一本科学哲学著作，也是一本化学哲学著作。全书分三篇共十一章。第一篇叙述门捷列夫化学元素周期律的诞生，这一伟大发现的时代背景、准备和完成，还论述了周期律最优表现形式的寻找和它以后的命运；第二篇介绍了发现元素周期律的方法，着重介绍了门捷列夫寻找这一伟大自然定律时所运用的思维辩证法，并进而探讨了发现过程中科学家的心理学机制，力图弄清楚科学家在作出科学发现的瞬间，他的决定性思想诞生进程中的规律性；第三篇描述了使门捷列夫作出发现的"化学牌阵"，其中叙述了寻找门捷列夫档案新材料的过程和对此材料的破译解读等细节，旨在告诉科学哲学家（包括化学哲学家）怎样深入去探讨一个科学发现的过程。

门捷列夫化学元素周期律在化学中占有突出的地位，研究这一伟大自然规律的发现过程，对化学家从事化学理论的发现有重要启示作用，而且也大大丰富了化学哲学研究

的内容。

（6）美国科学哲学家戴维·A·本兹的“发现的结构：化学键结构描述的演进”（载〔美〕托马斯·尼克勒斯编：《科学发现：案例分析》一书，波士顿科学哲学研究丛书第60卷，1980年），是探讨现代化学理论发现的哲学问题的一篇内容较深刻的著作。作者通过对海特勒-伦敦的化学键理论的探讨，提出了一个理解科学发现的框架，由此他回答了为什么海特勒-伦敦的相当定性的理论，应当被认为是一个具有重要意义的科学发现的问题。本兹认为，海特勒-伦敦的化学键理论显然是一个具有重要意义的科学发现，但必须用什么框架才能理解这种意义呢？因为如果按照传统科学哲学的观点来看海特勒-伦敦的发现，只能认为是量子力学与化学经验的结合，不能认为是化学学科中本身的一项重大发现。如果按照托马斯·库恩的观点，则海特勒-伦敦的工作只能当作是在新建立的量子论（薛定谔波动方程）的范式内的工作，只是对常规科学作出了贡献，因为新范式是可以解决旧范式所不能解决的疑难的。此外，也可以当作在化学这个领域内小范式的开始，即把量子论的新范式扩展到化学。这样，海特勒-伦敦的工作只能看作是“解决了计算的困难”，基本上与化学关系不大。那么，究竟在什么样的框架内可以认为海特勒-伦敦的工作是一个具有重要意义的科学发现呢？本兹认为，必须重新制订理解科学发现的框架，这个新框架就是：首先是科学问题的表述，接着是尝试的解和部分解，最后是科学问题的重新表述。用这样的框架来衡量，海特勒-伦敦的理论就是一个在化学中具有重要意义的科学发现了。这一探讨对于科学发现过程的研究，对于解决化学与物理学的关系提供了一条新的研究途径，所以，特别值得加以重视。

此外，美国芝加哥大学莫里斯·菲什贝恩、科学史及医学史研究中心教授阿伦·G·德巴斯正在从事科学革命和化学哲学的研究。据悉他们著述的有关化学哲学书籍有：《文艺复兴时的化学梦》（Cambridge，Heffer，1968）和《化学哲学》（New york，1977.）等。波士顿大学哲学系教授约瑟夫·阿盖西著有：《作为自然哲学家的法拉第》（Chicago：Univ. Chicago Pre.，1971）。

论　文

近年来，国外通过化学史研究来阐明哲学观点的文章日益增多。这里仅就笔者见到的若干重要论文作一介绍。

（1）Б. М. 凯德洛夫：“创造过程和认识阶段”（Природа，1981，No. 7）。该文着重论述创造活动与认识的关系。在论述创造及其“细胞”的历史观点时，他认为对创造性问题要持历史方法，也就是要注意创造发展的起点问题，即它的“细胞”问题。接着他谈到了门捷列夫的发现。“当有人向门捷列夫提出他如何发现周期律而成为他的科学创造的顶峰时，他回答说：‘无论探索什么东西——即使是采蘑菇，或无论寻找什么关系——一定要观察和实验’”。凯德洛夫评论说：“在寻找和发现极为简单的蘑菇中，表现出互相联系的心理认识上的两种作用：一是观察；二是实践和检验，没有这两种作用就不会有任何创造过程（新发现），其中包括新的自然规律、自然现象或者自然物体之间的新联系，包括元素的发现”。

凯德洛夫通过科学史实的考察，论证了人的认识过程是经历了三个阶段，即个别性、特殊性和普遍性。他认为科学发现的历史，作为创造过程，也与一切认识过程一

样，也经历了这三个基本阶段。化学史和化学元素的认识史也揭示了这三个阶段。起初一些元素常常是一些个别简单的物质被单独发现。在古代人们就知道了至少有七种金属加上硫和碳。从十八世纪中叶开始一直到十九世纪后三分之一世纪，新元素成批发现，当时在自然界里，按照元素的特殊性质一组一族地被发现了。在十九世纪初，开始把特殊性一致的元素划分为自然组——首先是“三合一”（每三个化学性质类似的元素为一组）；然后是化学性质类似的多个元素分为一组。1869年门捷列夫发现了整个早已形成的各组元素之间的普遍的有规律的联系（周期律），就是说通过元素间各组的联系而发现了周期律。以后的一些新元素就是借助于普遍规律指导发现的。门捷列夫根据元素周期律预言了当时还不知道的如镓、钪、锗等元素，后来，于1875—1886年间一一被发现了。凯德洛夫由此得出：“如果说从前自然界元素的组和族是根据具有相似的化学特性的元素组成的（这些化学特性相似的元素有别于所有其它元素）。那么，门捷列夫把所有元素及其组和族则根据它们共同的物理性质——原子量，统一到一个周期系中去了。这一发现成了作为创造过程的科学发现的突出典范，说明了科学发现在认识运动中实际上是按个别性、特殊性、普遍性这三个阶段进行的”。

凯德洛夫还以H.Д.捷林斯基发明防毒面具的过程，来说明科学发现也是经过了个别性、特殊性、普遍性三个基本认识阶段。

与这种认识的基本阶段相适应，就有各种人才类型。凯德洛夫介绍了法拉第的见解。法拉第根据科学认识发展中存在着一定的规律性来确定人才的类型。法拉第把认识发展分成四个阶段。第一个阶段，是发现新事实，相当于个别性阶段；第二个阶段，把新事实简化为某种原则，前提是必须分析新事实，把他们同过去确立的事实进行比较、分析，再以这些新事实同已知的科学原理相对照，然后再根据这些分析、对照，对这些事实进行分类。这个阶段相应于特殊认识阶段；第三个阶段，是未转化为某种原则的新事实的发现；第四个阶段，是把全部事实简化成更为普遍的原则。在这个阶段，对全部了解到的事实进行概括，综合处理以及创立新的理论。与这四个认识阶段相适应，可以把科学家分成四种类型，有的擅长于第一阶段的活动，有的则精于第三、第四认识阶段的探索，这与科学家具有不同的心理类型有关。

（2）詹姆斯·G列诺克的“罗伯特·波义耳对实验科学中目的论推理的维护”（ISIS，1983，74：38—52）。列诺克执教于美国匹兹堡大学科学史和科学哲学系。他在论文中引用萨默尔·约翰逊的话说：“波义耳的大名虽然受到了人们尊敬，但他的工作却为人们所忽视”，特别是波义耳的论文“关于自然物最终原因的探究”（本文收集在托马斯·伯赫所编的《罗伯特·波义耳著作集》第五卷中），这篇著作不仅对于我们理解当时的“机械论哲学家”的思想极关重要，而且对讨论包含目的论解释误解的产生，检验以至避免的方法论都有重要启示。

该文分四部分进行讨论：①波义耳“探究”一文的目的；②目的论解释的有效性；③目的论推理的模式；④确定性程度。作者认为，波义耳的这篇论文的历史意义需要特殊强调，因为它描述了“机械论哲学”的更现实主义的图景。我们知道，波义耳是以机械论哲学观点指导他的全部化学研究工作的。

（3）毛里斯·道马：“十九世纪的物理和化学研究与测量的精确性”（译文见《科学与哲学》1982年第1期）。化学史研究中，通常有一种说法，认为化学家由于借

助于精确的测量方法，才作出重大发现。例如，他们认为拉瓦锡由于借助精密天平才发现了氧，使化学发展到现代化学阶段。作者对此进行了深入探讨，并对这些说法提出了质疑。他指出，拉瓦锡在他阐明自己的伟大理论时，他所使用的仪器（包括天平）并不比他的同事更加精密。他说，实际上，拉瓦锡的化学在更大程度上是一门方法的化学而不是精确的化学。这是思想的新阐发的结果，同拉瓦锡最初找到证据的那些化学现象被发现之前的理论无关。在他之前，化学家都是医生或药剂师，他们经常使用天平，可是态度与拉瓦锡完全不同。因为按照燃素说系统化的传统观念，容许有无重量的元素参加了化学反应，这就没有必要设法去鉴别它们，特别是为此而使用天平。拉瓦锡对各种燃烧现象进行抽象，他的洞察力足以使他理解到化学的全部关键在于随着气体逃逸而造成燃烧物增重的事实，这一点甚至在他开始自己的研究以前就已想到了。这就是说，拉瓦锡的成功在于他已形成了一个与燃素说不同的新观念，而使用天平只是他检验自己想法所使用的工具罢了。当然，作者也肯定地认为，仪器的精确性在他所取得成果中也的确是起了重要作用。这一研究告诉我们，要作出化学成果还不能只迷恋于实验仪器和工具，重要的是要磨炼自己的思想，即理论思维的能力。

（4）M.马利："原子嬗变的发现——法国和英国的科学作风和哲学"（ISIS, V.70，译文见《自然科学哲学问题丛刊》1980年第1期）。该文介绍了原子嬗变发现过程中，两种不同哲学思想的指导对科学发现所产生的不同影响：居里夫妇虽然发现了镭，而且对放射性研究的起步较早，本可提出原子嬗变理论，但由于彼埃尔·居里的学术思想较为保守，又受到当时法国的实证主义哲学影响较深，而把放射性粒子仅仅当作是能量，因而失去了发现原子嬗变的良机。卢瑟福和索迪虽则对放射性的研究起步较晚，镭源又是从居里夫妇那里借来的，但由于他们受着英国传统的唯物主义哲学的影响，在新的科学事实面前，思想比较活跃，敢于提出新的假说来说明实验事实，终于发现了原子嬗变理论。该文最后说："在1899—1903年间，法国和加拿大平行地进行放射性研究说明了一个明显的事实：一个人的科学与他的哲学密切相关。由于居里和卢瑟福利用相似的实验方法提出相似的问题，所以，当时所处的科学环境几乎是一样的。然而他们却得出迥然不同的结论，这是因为他们对射气的本性作了相反的假设而且对科学理论的作用持不同的观点。居里的实证主义明显地妨碍了他在放射性研究中取得进展。实证主义不仅仅只是使他过分地谨慎，而且使他事先倾向于一个没有结果的热力学模型。他只是提供了最一般的组织方案——由于它不能提示进一步的实验，所以不是一个富有成果的方案。他作为一个实证主义者把模型看得相对地不重要，因而他没有以很大兴趣去验证他的模型。在有利于唯物主义假说的实验证据面前，居里的态度显得固执，甚至缺乏理性，……并且以信仰一种不值得信仰的科学哲学而自满自足"。因而使他们在放射性研究中失去了重大发现的良机。

（5）汉纳赫·盖伊的"基团和类型：对波普尔和拉卡托斯方法论及它们用于重组十九世纪某些化学的批判性比较"（Stud. Hist. Phi. Sci. 7，1976，No. I）。这是一篇科学哲学文章，但所用的材料则是十九世纪的两个化学理论：基团论和类型论，作者通过这两个理论的发展和演变的考察，比较了波普尔的证伪主义方法论和拉卡托斯科学研究纲领方法论的优劣，并从这些化学史实中得出作者本人认为是取两家之长的新方法论。文章以五十多页的篇幅详细介绍了戴维、贝采里乌斯、李比希、维勒、杜马、罗

朗、热拉尔、本生、威廉逊、富兰克兰和凯库勒等十九世纪著名化学家的工作，讨论了科学的目的和方法，讨论了理性与非理性因素在科学知识增长中的地位和作用，还讨论了科学哲学中的一些重要概念如可检验性、可接受性标准等方面的哲学问题。它从一个方面展示了化学史研究与科学哲学研究的结合为化学哲学研究提供新途径。

（6）D.W.西奥博尔德："关于化学哲学的一些考虑"〔伦敦《化学学会评论》，1976.5（2），P.203—213〕。该文首先考察了化学与炼金术的关系，接着比较了化学解释和物理解释的区别。作者指出，不应该把科学归结为单一的解释，科学的解释有多种多样，化学与物理学是从不同的角度去解释物质及其运动规律的，所以化学是与物理学不同的一门学科。文章也同时探讨了化学学科的地位和作用等问题。

除了以上介绍的论文外，还有不少有关化学哲学的论文散见于报章杂志上，现将作者和题目等介绍于下：

① 〔美〕史蒂芬·图尔敏："判决性实验：普利斯特列和拉瓦锡"（J. Hist. Ideas，1957，18：205—220）。

② 〔美〕希尔伯特·欧文："凯库勒价键理论的实验基础"（J. Chem. Educ. 1959，36：320—327）。

③ 〔美〕希尔伯特·欧文："力学在化学中的作用"（Actes XIe Cong Int. Hist Sci.，1965）。

④ 〔美〕托马斯·P.休斯："路易斯的价键理论观念"（Bri. J. Hist. Sci.，1975，8：233—239）。

⑤ 〔美〕阿诺德·撒克里："道尔顿化学原子论的出现：1801—1808"（Bri. J. Hist. Sci.，1966，8：1—23）。

⑥ 〔美〕阿诺德·撒克里："道尔顿化学原子论的起源"（ISIS．1966，57：35—55）。

⑦ 〔美〕约瑟夫·阿盖西："谁发现了波义耳定律？"（Stud. Hist. Phil. Sci.，1977，8：189—250）。

⑧ 〔美〕阿伦·G.德巴斯："哲学的化学和科学革命"〔Actes XIe Cong. Int. Hist. Sci.，1965（Pub.1968），4：26—30〕。

⑨ 〔日〕日本化学会编："化学的发明和发现"，大日本图书KK.1959。

⑩ 〔日〕中川直哉："试论科学方法论——从有机化学的观点谈起"，《科学》1968年8月号。

以上介绍远非完整，只是一个梗概，有待进一步补充。

金　吾　伦

（三）苏联化学哲学著作简介

近几十年来，国外对于化学哲学的研究已日益引起广泛重视，许多国家出版的有关化学哲学的著作日益增多。但是从目前我们所能见到的资料看来，还是以苏联出版的化学哲学著作居多。因此这里先着重介绍一下苏联化学哲学著作的情况。

在苏联，从事化学哲学问题研究的有许多著名学者，若一一指出他们的名字，可以列出一个长名单。象Б.М.凯德洛夫，Ю.А.日丹诺夫，Г.В.倍柯夫，В.И.库兹涅佐夫，Ю.И.萨拉维也夫，Р.В.卡尔考文柯，Р.А.维哈列姆，А.А.别切金，Р.Б.达布罗金等，都是著有化学哲学专著或者常在刊物上发表化学哲学论文的学者。他们中间有著名的哲学家，也有知名的化学家。例如，Б.М.凯德洛夫是苏联著名的哲学家，苏联科学院院士，他在一般哲学和自然科学哲学方面颇有建树，在化学哲学方面也写了不少著作。又如Ю.А.日丹诺夫，是苏联知名的化学家，苏联科学院通讯院士，曾任罗斯托夫大学校长和北高加索科学中心主席，他在化学（主要是有机化学）领域著有专著，同时积极从事化学哲学问题研究，除了在刊物上发表了许多化学哲学论文以外，还写了这方面的专门著作。

苏联出版的化学哲学著作，大致可以划分成三种形式，即：专著、论文集和论文。

近二十多年来，苏联出版了一些化学哲学专著，就其内容来说，可以归纳成四大类：

第一类，关于化学哲学的一般问题，包括化学哲学的研究对象和内容，化学与哲学的关系，化学运动形式及其与其它运动形式的关系等等。Р.В.卡尔考文柯在他的《现代化学的某些哲学问题》（莫斯科，1968）和《现代化学的哲学问题》（莫斯科，1970）两本小册子中，主要论述了化学哲学的研究内容，化学与自然界的科学图景，十九、二十世纪化学粒子质的多样性的发现及其哲学意义等问题。В.Н.博里亚兹和Е.Ф.萨拉波夫合写了一本书，题为《化学的哲学问题。辩证唯物主义研究的历史概述》（列宁格勒，1976）。在这本250页的著作中，作者首先概述了马克思主义经典著作关于化学哲学问题的提出及其发展，在此基础上讨论了化学运动形式以及与其它运动形式（主要是与物理运动形式和生物运动形式）之间的关系。他们着重从经典作家的论述和从方法论的角度提出了自己的见解。Р.Б.达布罗金的小册子《物质的化学运动形式》（列宁格勒，1967），也专门讨论了化学运动形式的划分以及与其它运动形式的关系问题。Н.А.布德列依柯于六十、七十年代先后出版了三本化学哲学著作，论述化学与哲学的关系，这三本著作的题目是：《哲学，物理学，化学》（莫斯科，1964），《化学与哲学》（基辅，1966），《论化学与哲学的相互关系》（莫斯科，1970）。此外作者还以《唯物辩证法与化学》为题，撰写了哲学科学博士论文，其摘要于1971年在莫斯科发表。应当指出，关于化学与哲学的关系等化学哲学问题，早在五十、六十年代，我国读者熟知的作者М.И.沙赫巴洛诺夫就已写过专门著作，如《化学哲学问题纲要》（莫斯科，1957），《辩证唯物主义与物理学和化学的若干问题》（1958年出版，我国科学出版社于1960年出版了中译本）和《化学与哲学》（莫斯科，1962）。有关这类问题的近期著作，应当提到В.С.弗亚佐夫金娜的《辩证唯物主义哲学与化学。自然界的化学图景及其演化》（莫斯科，1980）。作者在书中讨论了化学知识的世界观意义，提出了自然界的化学图景的概念，论述了唯物主义哲学与化学的关系。关于自然界的化学图景的提法，在苏联化学哲学文献中是有争论的（参见维哈列姆的综述文章，见《哲学科学》1982年第1期，148—151页）。

第二类，关于化学的基本概念和理论的发展规律及其哲学意义，以及对化学史的哲学分析等。这方面的著作很多，例如Б.М.凯德洛夫在五十到七十年代先后发表了七部

著作：《化学元素概念的演化》（莫斯科，1956），《伟大发现的一天》（莫斯科，1958），《德·依·门捷列夫关于周期律的早期著作（1869—1871）的哲学分析》（莫斯科，1959），《关于原子论的三种观点》（莫斯科，1969），《伟大发现的微观解剖学。门捷列夫周期律100周年》（莫斯科，1970），《恩格斯论化学》（莫斯科，1971），《恩格斯论化学的发展》（莫斯科，1979，系对《恩格斯论化学》一书修改和补充而成）。凯德洛夫还与Д.Н.特利弗诺夫合作写了《周期律和化学元素。发现和年表》（莫斯科，1969）一书。从这些著作的题目可以看出，凯德洛夫的早期化学哲学著作，主要是围绕化学元素概念和原子学说的发展，以及周期律的发现等专题化学史问题而展开的。他在《恩格斯论化学的发展》一书中，则对化学的发展进行了全面的哲学分析。在这部综合性的化学史著作中，他以恩格斯论述过的五位化学家（波义耳、拉瓦锡、道尔顿、门捷列夫和肖莱马）的科学创造和科学思想为线索，对化学科学的发展进行了历史的和哲学的分析。凯德洛夫对化学史和化学专题史的哲学分析，总起来说涉及到了两个方面的问题，即人类对化学研究的历史和某一位化学家对某个问题的认识过程（即科学发现和科学创造过程），而这两个方面是互相联系的，凯德洛夫在他的著作中清楚地揭示了这种联系。

В.И.库兹涅佐夫和Ю.И.萨拉维也夫也作了类似的工作，库兹涅佐夫写了几本书，其中有：《关于化学基本定律的理论观念的演变》（莫斯科，1967），《化学发展的辩证法。从历史到化学发展的理论》（莫斯科，1973）。应当指出，库兹涅佐夫的化学哲学研究是和化学史研究密切联系着的（他在化学专题史方面也有不少专著），化学哲学研究以化学史研究为基础，而化学史方面的著作又渗透着哲学分析。萨拉维也夫著有《化学的基本理论问题的演化》（莫斯科，1971）一书，也是把化学史的研究和化学哲学问题研究密切结合在一起。在对化学史进行分析方面，还有些学者发表了一些研究成果。例如，А.А.别切金于1976年在莫斯科出版的《量子化学发展的方法论问题》，其中，作者从量子化学这门学科的性质和发展等方面，系统地分析了量子化学形成和发展的一些方法论问题，讨论了量子力学和化学的关系，以及应用量子力学解决化学课题的一些方法论问题，并分析了在这方面有争论的一些问题，如还原论等。又如，1975年莫斯科科学出版社出版的Н.И.罗德内的一本文集《自然科学的历史和方法论概论》，其主要内容也是关于化学理论发展的规律等。

第三类，关于化学研究方法。这方面的著作不多，Ю.А.日丹诺夫等人发表了几本著作，这里指的是：Ю.А.日丹诺夫的《有机化学方法论概要》（莫斯科，1960），《有机化学中方法的变换》（罗斯托夫，1963），А.Г.邦达尔的《化学工艺学中的数学模拟》（基辅，1973），Г.С.亚布龙斯基的《化学动力学的数学模型》等。此外，В.А.施托夫还写了《模型在认识中的作用》（列宁格勒，1963），《模拟和哲学》（列宁格勒，1966）等，也涉及化学的方法。

第四类，关于化学史、化学家传记等。严格地说，这方面的著作已不能归为化学哲学的著作范围了，但是，苏联出版的这方面的著作中，除了提供丰富的史料以外，许多作者很注意理论思想、世界观和方法论。例如：倍柯夫的《经典化学结构理论的历史》（莫斯科，1960），《有机化学史》（莫斯科，1976），《有机化学电子理论的历史》（莫斯科，1963），《有机化合物立体化学的历史》（莫斯科，1966），萨拉维也夫的

《物理化学史概要》（莫斯科，1964）；法耶尔什金的《分子学说史》（莫斯科，1961）；库兹涅佐夫的《关于催化学说的发展》（莫斯科，1964），《催化有机合成的发展》（莫斯科，1964），《二十世纪化学原子学说发展概要》（莫斯科，1960），他还主编了《原子价学说的发展》，等等。至于化学家传记，那就更多了，在此不一一列举。

其次简略介绍一下化学哲学论文集的情况。化学哲学论文集是化学哲学著作的一种重要形式，许多年来，在苏联不断出版这类著作。在这里仅按年代顺序介绍几本重要的著作。1960年，莫斯科科学出版社出版了一本题为《动力学、催化和反应能力领域概念的发展》论文集，收录了罗德内、邦斯基、库兹涅佐夫、马林娜、倍柯夫等人的论文，内容涉及十九世纪化学动力学发展的特征，链式反应理论的产生，自由基聚合概念的发展，催化理论发展的趋势，化学中电负性学说的发展等。1967年在莫斯科出版了《现代化学的方法论问题》一书，收集了苏联国内外一些学者的论文，如O. T. 别菲的"化学中的时间概念"，Г. Н. 巴尔顿的"物理学的成就对化学科学的影响"，海森堡的"近75年中物理学和化学之间的相互关系"等。1971年在莫斯科又出版了两本论文集：《现代化学的哲学问题》和《化学元素周期律100周年，1869—1969》。前者主要是讨论关于现代化学的发展，化学与物理学的相互关系问题；后者则主要讨论化学元素周期律发现的意义，化学元素周期律的发展等。1974年，在基辅出版了《化学发展的认识论和社会问题》，书中讨论了化学理论发展的认识论问题，对化学基本范畴的认识论分析，化学研究方法等（如模拟方法、系统结构方法）。1975年，倍柯夫、达布罗金、特利弗诺夫等人合作撰写了《理论化学中的模拟》（莫斯科出版），该书主要阐述模拟方法及其在现代化学中的应用等问题。八十年代又有一本化学哲学论文集问世，题目是《化学的方法论和哲学问题》（诺沃西比尔斯克，科学出版社，1981）。全书分作四篇：第一篇讨论在现代科学技术革命条件下化学科学发展的一般问题，如化学与技术进步，化学发展中理论与实践的相互作用，物质化学运动形式，化学发展的趋势等；第二篇阐述化学研究的方法论和逻辑问题；第三篇说明了化学及其在自然科学体系中的地位；最后一篇是关于现代化学发展的哲学综合与方法方面的问题。

应当指出，化学哲学问题是自然科学哲学问题的一个有机组成部分，在苏联出版的一些自然科学哲学著作和论文集中，也常常包含化学哲学方面的内容，这也是我们研究化学哲学文献的一个不可忽略的方面。举例来说，1968年在莫斯科出版的《现代自然科学中的发展问题》一书中，就有三篇化学哲学论文（关于化学进化与生命进化的关系，发展问题与现代化学原子论，物质的发展和有机化学等），1979年列宁格勒大学出版社出版的《自然科学和技术科学的方法论基础》（作者：B. A. 卡尔布宁，Б. М. 苏哈诺夫，В. И. 沙罗格拉茨基），专门有一章论述化学哲学问题，题目是"化学的方法论基础"，分别论述了现代化学发展中的一些重要的哲学问题，如化学科学的对象，辩证法在认识化学现象的特性问题中的方法论功能，化学中实验与理论的相互关系，化学中的发展观念，等等。这方面的书很多，不再一一列举。

最后简单谈谈苏联化学哲学著作的第三种形式，即在各种刊物上和著作中发表的论文。在苏联各种刊物（化学的、科学史的、哲学的以及大学的学报等）上和许多自然科学哲学著作中发表的化学哲学论文，数量甚多。据不完全统计，二十多年来发表近200

篇。论文涉及的内容也非常广泛，如化学的对象，化学运动形式问题，化学哲学的对象和内容，化学概念和理论的发展规律，化学研究方法和方法论等等。下面，分七个问题列出苏联化学哲学论文的主题索引，供读者查阅和参考。

苏联化学哲学论文主题索引

（1）化学的对象、化学运动形式和化学科学

Я.И.格拉西莫夫：物质的化学运动形式及其与其它运动形式的联系，化学的对象，莫斯科大学学报1963年第6期。

В.П.维兹金：关于现代化学对象的确定，自然科学和技术史问题（莫斯科）1976年第4卷，17—24页。

Р.В.卡尔考文柯：物质的化学运动形式，见《空间、时间、运动》一书，莫斯科，1971，277—285页。

Р.Б.达布罗金，В.П.巴尔扎柯夫斯基：关于物质的化学运动形式的特点问题，哲学问题1963年第5期，100—105页。

Р.Б.达布罗金：物质的化学运动形式的发展层次，见《科学认识中的层次和系统问题》一书，明斯克，1970，82—97页。

С.В.济宁：关于化学运动形式问题，哲学问题1975年第4期，141—144页。

Р.С.卡尔宾斯卡娅：物质的化学运动形式和生物运动形式的共性和特性，见《辩证唯物主义和自然科学问题》一书，莫斯科，1964，293—311页。

Р.С.卡尔宾斯卡娅，В.П.维兹金：进化问题和化学运动形式，莫斯科大学学报（哲学分册）1966年第3期，35—46页。

С.А.克里森娜：关于物质的化学运动形式的基本矛盾问题，见《现代科学的某些方法论问题》一书，萨拉托夫，1971，78—85页。

Т.И.科拉索维茨卡娅：关于物质的化学运动形式和物理运动形式之间的联系问题，莫斯科技术学院科学论丛1977年第97期，100—102页。

В.В.斯维利多夫：物质的化学运动形式和物理运动形式之间的联系问题，见《辩证唯物主义是自然科学认识的方法论》一书，明斯克，1965，70—78页。

Л.М.谢多娃：物质的化学运动形式发展的方向性。见《物质的发展是合乎规律的过程》一书，别尔姆，1978，166—168页。

Е.Ф.萨拉波夫：物质的化学运动形式的特点和发展原则，见《现代自然科学中的发展问题》一书，莫斯科，1968，121—133页；论运动形式和物质层次，科学哲学1972年第3期，57—63页。

М.И.沙赫巴洛诺夫：物质的化学运动形式，见《辩证唯物主义和自然科学问题》一书，莫斯科，1964，264—292页。

Ю.А.日丹诺夫：关于化学科学的一般定义，普通化学杂志1956年第26卷第1期。

Н.Н.谢苗诺夫：现代化学科学的任务，见《新化学》一书，莫斯科，1964，9—36页；化学物理学，问题和前景，见《十月革命与科学》一书，莫斯科，1977，283—296页。

Г.В.切林采夫：论化学科学，哲学问题1953年第6期，190—204页。

К.Б.亚茨米尔斯基：现代无机化学的理论问题，全苏门捷列夫化学学会杂志1972年第17卷第3期，267—276页。

В.И.库兹涅佐夫：关于化学的某些趋向，见《关于化学的科学方法论文集》一书，苏联高等和中等专业教育部，1978年第6卷，6—9页；从化学看科学发展的演化系列，见《自然科学和技术的历史和方法论问题》一书，阿什哈巴德，1978，23—34页。

А.Т.莫斯卡连柯，А.Л.谢曼诺夫：在科学技术革命条件下现代化学的发展，哲学问题，1978年第10期，157—159页。
М.А.塔里罗兹：化学在自然科学体系中的地位，见《化学的方法论和哲学问题》一书，诺沃西比尔斯克，1981，214—217页。
Г.Н.帕尔顿：物理学的成就对化学科学的影响，见《现代化学的方法论问题》，莫斯科，1967。
И.基特利赫：从运动形式的观点来看物理学和化学之间的相互关系，社会科学问题，基辅，1971年第6卷，140—146页。

（2）化学哲学，化学与哲学

Р.А.维哈列姆：化学哲学问题的对象和特点（文献和研究前景综述），见《模拟方法及自然科学的历史和方法论的某些哲学问题》一书，塔林，1975，144—158页；论哲学在理论化学发展中的作用，见《化学哲学问题》一书，罗斯托夫，1972；关于化学哲学问题的深入研究，哲学问题1974年第6期，90—95页；是否可能存在自然界的化学图景，哲学问题1982年第1期，148—151页。
Р.В.卡尔考文柯：化学的发展和认识问题，见《辩证唯物主义的现代认识论问题》一书，莫斯科，1970，第1卷，163—204页。
Ю.А.日丹诺夫：反映论和现代化学，见《列宁的反映论和现代性》一书，索菲亚，1969，526—539页；唯物辩证法和化学进化问题，哲学问题1980年第2期，59—80页。
В.И.库兹涅佐夫：哲学思想斗争和化学的发展，见《现代自然科学中的哲学思想斗争》一书，莫斯科，1977，123—134页。
Е.Ф.帕尼娜：哲学和化学的相互联系的某些问题，见《科学的哲学问题》一书，莫斯科，1972，31—35页。
М.А.帕尔纽克，Р.В.卡尔考文柯：化学和自然辩证法，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，51—62页。
И.切列达：化学在世界观发展中的作用，见《哲学和自然科学》一书，莫斯科，1965，第229—345页。

（3）化学中的哲学问题，化学的辩证内容

А.М.戈鲁勃，А.Н.彼特鲁钦柯：化学和现实性，见《列宁和现代科学方法论问题》一书，基辅，1971。
О.Т.别菲：化学中的时间观念，见《现代化学的方法论问题》一书，莫斯科，1967，182—191页。
В.П.维兹金：论化学进化和生命进化的相互关系，见《现代自然科学中的发展问题》一书，莫斯科，1968，177—186页。
В.Н.维斯罗夫斯基：论生命和它的化学基础的相互关系，见《边缘科学问题的哲学》一书，别尔姆，1972，第5卷，第56—62页。
В.С.弗亚佐夫金：高分子化学中量变质变规律，喀山化学工艺研究所论丛，1968，第38卷，第83—87页。
А.А.丹彩夫：论化学中质和量概念的发展，诺沃切尔卡斯克综合技术研究所丛刊1972年第261卷，47—53页。
С.Е.扎克：质变和结构，哲学问题1967年第1期，50—59页。
В.И.库兹涅佐夫：论化学中质变的特点，哲学问题1964年第11期，94—102页。
М.А.乌拉诺夫斯卡娅，Н.Н.别凯托夫：论化学过程的质的特性，哲学科学1960年第1期，165—174页。
Р.Н.布尔德埃格拉：物质的化学组成的间断性和连续性，格鲁吉亚苏维埃社会主义共和国科学院无机化学和电化学研究所（青年科学工作者代表大会资料），第比里斯，1976，22—25页。
А.З.古佐尔，В.Г.塔舒克：化学和哲学中的间断性和连续性问题，见《现代科学的方法论问题》一

书，基希涅夫，1978，50—57页。
В.Ф.扎哈罗夫：间断性和连续性的相互关系以及对化学组织的认识，见《现代科学认识的方法论问题》一书，莫斯科，1974，第1卷，218—225页。
Б.М.凯德洛夫：物理学和化学中的间断性和连续性思想，自然1972年第2期，28—32页。
В.И.库兹涅佐夫：在化学物质结构的连续性和间断性观念中的新因素，哲学问题1963年第10期，61—70页。
Н.С.库尔纳柯夫：物质化学转化中的间断性和连续性，著作选，第1卷，莫斯科，1960，123—134页。
Р.В.卡尔考文柯：化学粒子质的多样性和化学的某些方法论问题，哲学问题1963年第5期，89—99页。
Г.В.科里沃柯雷托娃：二十世纪化学中新物质粒子发现的哲学意义，哲学问题1958年第1期，84—95页；二十世纪的哲学之石，莫斯科，1969。
В.К.沙拉也夫：普遍联系原则和门捷列夫周期律，莫斯科大学学报(哲学版)1973年第6期，20—30页。
А.М.戈鲁勃：门捷列夫周期律和辩证法规律，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，251—262页；门捷列夫周期律的科学本质，见《关于化学的科学方法论文集》，苏联高等和中等专业教育部，1978，第5集，7—16页。
А.З.古佐尔：论辩证法规律在现代化学动力学的某些理论中的表现，奥德萨高等航海学校马列主义教研室丛刊，莫斯科，1957，3—10页。
Ю.А.日丹诺夫：化学中的同一与差异的辩证法，哲学科学1958年第4期；化学中的整体与部分的相互关系，哲学科学1960年第1期，82—89页；物质的发展和有机化学，见《现代自然科学的发展问题》一书，莫斯科，1968，134—151页；论化学结构的统一性和辩证法，罗斯托夫，1961；引发的因果性，哲学问题1976年第6期，87—92页。
Б.Н.祖也夫：化学中的因果性原则，吉尔吉斯伏龙芝医学院哲学和科学共产主义教研室文集，1969，113—122页。
К.И.伊万诺娃：现代化学中的因果性原则，哲学问题1978年第10期，77—86页。
С.А.克里森娜：论化学中的结构范畴，见《科学认识中的结构问题》一书，萨拉托夫，1965，20—44页；结构范畴及其在化学中的应用，萨拉托夫，1967。
А.Г.萨拉明娜：化学客体的结构和本质，喀山大学研究生论文选，喀山，1974，123—127页。
В.С.弗亚佐夫金：作为科学知识系统化的化学自然图景，哲学科学1977年第6期；物理化学在建立自然界的化学图景中的作用，哈尔科夫大学学报1978年第175期，27—30页。

（4）化学概念和理论的发展及其哲学、方法论问题

А.阿姆斯杰达姆斯基：化学元素概念的发展，见《科学抽象的世界观和方法论问题》一书，莫斯科，1960，153—214页。
Б.М.凯德洛夫：伟大发现的一天的辩证分析（化学元素周期律100周年），哲学问题1969年第3期，60—71页；门捷列夫周期律的发现过程，见《周期律和原子结构》一书，莫斯科，1971，5—40页。
А.И.特利弗诺夫：关于化学元素的发现，全苏门捷列夫化学学会杂志1977年第22卷第6期，629—639页。
Н.А.费古罗夫斯基：门捷列夫以前的化学元素的分类，自然科学和技术史问题（莫斯科）1969年第4卷，71—76页；化学元素的发现及其名称的由来，莫斯科，1970。
О.П.恰尔金：原子价和化学键概念的演化，全苏门捷列夫化学学会杂志1972年第17卷第3期，251—258页。

Э.И.舍布杜诺娃：关于化学化合物和化学个体概念的发展．莫斯科．1969．
Р.А.维哈列姆：在化学亲合力学说的历史中认识从现象到本质的运动，科学家论丛，
学，1968，第22卷，77—92页；从认识的基本阶段来看化学亲合力学说的发展，
Э.Б.伊曼诺娃：化学结构概念的形成和发展，见《现代科学认识的方法论问题》一书，
1974，第1卷，205—217页；关于化学中结构层次系统的结构系统观点，见《动力学和科学
的方法论问题》一书，巴库，1976，205—213页。
В.И.戈尔丹斯基：化学和物质结构研究的发展道路，苏联科学院通报1976，第3期，36—50页。
Э.И.斯米尔诺娃：结构理论发展的某些规律性，研究生和初级科学研究员第14次科学大会论文，苏联科学院自然科学和技术史研究所，莫斯科，1971，84—88页。
А.М.阿赫加莫夫：化学式发展的辩证法，喀山化学工艺研究所丛刊1974年第54卷，3—7页。
Б.М.凯德洛夫：化学史中科学发现的类型学，自然科学和技术史问题（莫斯科）1977年第1期，40—51页；化学的发现，它的一般类型，全苏门捷列夫化学学会杂志1977年第22卷第6期，609—617页；门捷列夫发现周期律时元素系统化的形式和对其深入的研究（1869—1971），自然科学和技术史问题（莫斯科）1969年第4卷，59—70页。
А.Н.科里沃马佐娃：放射化学中发现的特点，全苏门捷列夫化学学会杂志1977年第22卷第6期，646—648页。
М.Н.拉特曼斯基，В.А.克利茨曼：化学反应的发现，全苏门捷列夫化学学会杂志1977年第22卷第6期，649—661页。
Р.Б.卡尔考文柯：发展问题和现代化学原子论，见《现代自然科学中的发展问题》一书，莫斯科，1968，164—176页；化学的基本范畴的认识论分析，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，63—165页；生产化学化的某些理论问题，哲学问题1964年第8期，9—17页。
А.И.吉达依格洛茨基：化学中的理论问题，哲学问题1966年第1期，76—86页；化学理论问题，见《唯物辩证法和自然科学方法》一书，莫斯科，1968，443—461页。
В.И.库兹涅佐夫，А.А.别切金：化学的概念论体系，结构和动力学观点，哲学问题1971年第1期47—56页；量子化学理论的认识论方面，哲学科学1972年第5期，83—90页；化学的概念论体系，共振论，哲学问题1972年第5期，75—86页；量子化学的形成，见《现代科学知识的综合》一书，莫斯科，1973，551—569页。
В.И.库兹涅佐夫：科学发现的偶然性和化学发展的规律性，全苏门捷列夫化学学会杂志，1977年第22卷第6期，618—628页。
Р.В.库切尔：化学理论发展的方法论问题，哲学问题1969年第6期，78—85页。
Г.С.奥西波夫，Р.О.马杰沃斯扬：关于化学键本性的现代观念的特点和对化学概念发展的哲学分析，见《现代科学认识的特点》一书，斯维尔德洛夫斯克，1974，122—139页。
Н.П.帕尔什娜：经典有机化学中的整体性原则，哲学科学（阿拉木图）1976年第8期，131—143页。
Н.М.埃曼乌埃尔：关于化学反应学说的某些方法论观点，苏联科学院通报1970年第6期，64—75页。
М.Г.维斯洛夫：量子力学和量子化学的发展，见《科学之间相互作用的方法论问题》一书，列宁格勒，1970，263—276页。
А.А.别切金：化学发展的规律性，自然科学和技术史问题（莫斯科）1975年第4（49）卷，94—95页。
Л.Л.波特科夫：关于化学发展规律性的学术讨论会，哲学问题1974年第9期，159—164页；最初的化学理论形成的方法论问题，见《科学结构和新知识形成的机制》一书，莫斯科—奥波宁斯克，1977，158—160页。
Ю.И.萨拉维也夫：关于某些化学理论形成的历史，全苏门捷列夫化学学会杂志1977年第22卷第6期，682—692页。

M.И.沙赫巴洛诺夫：化学发展的某些一般规律性，见《辩证唯物主义与现代自然科学》一书，莫斯科，1969，122—139页。

B.П.马依柯夫：相变和化学变化的信息观点，见《化学工艺过程和工具，系统信息观点》一书，莫斯科，1977，7—69页。

A.П.鲁金科：化学中的系统结构观点，莫斯科大学学报（化学版）1973年 第14卷 第6期，751—752页。

Б.П.尼科尔斯基，M.B.波兹沃尔斯基，B·H·弗多文柯：放射化学和周期律，见《化学元素周期律100周年，1869—1969》一书，莫斯科，1971，213—219页。

Б.П.尼科尔斯基，M.M.舒里茨，P·Б·达布罗金：相律和物理化学，物理化学杂志1976年 第50卷第12期，3019—3030页。

Г.Г.西博格：周期系的扩大，见《化学元素周期律100周年，1869—1969》一书，莫斯科，1971，21—39页。

H.И.罗德内：化学中相互竞争的理论之间的斗争，见《自然科学发展中的矛盾》一书，莫斯科，1965，217—275页。

K.Л.安特罗波娃：化学发展中继承性的形式，自然科学和技术史问题（莫斯科）1979年 第61—63卷，79—80页。

Ф.Ф.戈利科夫：关于化学知识的继承性问题，科学家论丛，托姆斯克大学，1970，第85卷，123—128页。

C.A.巴列金，A.Д.别列杜林：物理学和化学的相互影响，通向新发现的道路，中学化学1966年 第1期，6—14页。

Г.M.巴尔金也夫，Ю.B.泽列涅夫，A.Д.别列杜林：物理学和化学及其相互联系，中学化学1968年第5期，5—8页。

Д.阿塔耶夫：量子力学在认识化学过程中的作用，土库曼苏维埃社会主义共和国科学院通报1965年第1期，23—31页。

И.M.图鲁科娃：化学思想及其客观特性，哈萨克苏维埃社会主义共和国科学院通报1975年第10期，65—68页。

Ю.A.日丹诺夫：现代理论化学的中心概念，哲学问题1976年第6期，102—113页。

A.A.丹彩夫：关于化学键电子理论观念的发展，诺沃切尔卡斯克综合技术学院丛刊，1973，第285卷，122—128页；对于化学键作为整体的说明，同上刊物，1973，第290卷，3—6页。

E.A.马姆丘尔，A.A.别切金：化学中的科学革命，哲学科学1980年第5期。

P.K.加依努基诺夫：化学中间断性和连续性思想斗争的哲学意义，见《哲学和社会心理学》一书，列宁格勒，1974，10—14页。

И.C.特米特利也夫，Л.A.卡尔佐娃：化学结构理论和芳香性问题（历史观点），化学的历史和方法论问题，列宁格勒，1978，第2卷3—23页。

（5）化学研究方法和方法论

A.M.阿赫加莫夫：关于化学化合物电子结构的形式模拟，喀山化学工艺研究所丛刊，1976，第56卷，10—16页；作为化学行为模型的结构式，同上刊物，1974，第54卷，8—12页；作为符号模型的化学式，同上刊物，1975，第56卷，3—6页。

Л.И.巴拉巴什：关于符号的联系和意义，见《科学方法论问题》一书，托姆斯克，1972，第1卷，62—71页。

Г.B.倍柯夫：应用于化学的模型的分类，见《理论化学中的模拟》一书，莫斯科，1975，5—29页；结构化学中的模拟，同上书，29—63页。

A.И.特利弗诺夫：周期性理论中的模拟和模型，见《理论化学中的模拟》一书，64—138页。

Н.В.基文柯：模拟及其在化学中的应用，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，229—236页。
В.В.斯维利多夫：认识客体的理想化及其在化学中的应用，见《辩证唯物主义是现代自然科学方法论》一书，明斯克，1966，266—273页。
Р.А.维哈列姆：论化学向定量研究的转变，科学家论丛，塔尔图斯克大学，1970，第273卷，12—17页。
В.И.塔乌别克：关于定量方法在现代化学中作用的增长问题，苏联科学院西伯利亚分院通报（社会科学版）1966年第1卷，76—82页。
Р.В.卡尔考文柯：化学中的系统-结构方法，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，236—250页。
В.И.耶菲莫夫，В.А.柳采达尔斯基，Б.М.达朗诺夫：关于对化学客体的质和量方法的认识，诺沃切尔卡斯克综合技术学院丛刊，1972，第261卷，53—60页。
С.А.克里森娜：结构分析对研究化学过程的某些应用，见《关于物质的结构和性质问题》一书，萨拉托夫，1966，23—42页。
В.И.库兹涅佐夫：有机结构分析的发展前景，苏联科学院通报1957年第1期，13—22页。
А.Я.吉布尼斯：关于化学热力学方法的历史，自然科学和技术史问题（莫斯科）1969年第2卷，32—36页。
Л.Л.特卡丘克：化学研究中的分析与综合的相互关系，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，215—229页。
Ю.А.日丹诺夫：化学中分析与综合的统一，哲学科学1961年第4期，95—99页；有机化学中的模拟，哲学问题1963年第6期，69—74页；化学中的历史方法，哲学问题1977年第10期，126—141页。
Ю.Г.波诺马连柯：化学研究的方法论，见《化学发展的认识论和社会问题》一书，基辅，1974，202—215页。
О.П.沙莫林，М.М.舒里曼：化学的方法论问题，北高加索高等学校科学中心通报（社会科学版）1973年第2期，76—79页。
Р.Б.达布罗金，В.А.施托夫：化学领域中的模拟的某些方法论问题，见《自然科学认识中的哲学范畴》一书，明斯克，1972，177—191页。
Р.Б.达布罗金：现代化学中的模型和经验的关系，见《现代化学中的模拟》一书，莫斯科，1975，139—173页。
В.В.瓦尔科夫：关于现代化学的某些方法论问题，见《化学的方法论和哲学问题》一书，诺沃西比尔斯克，1981，116—139页。
В.С.舍布列夫：化学工艺学的方法论问题，见《化学的方法论和哲学问题》一书，诺沃西比尔斯克，1981，184—189页。
Б.А.阿尔布佐夫：物理学研究方法对研究有机物的意义，苏联科学院通报1962年第8期，26—33页。
Д.А.米基金柯：生物学、化学和物理学的相互关系的方法论问题，见《整体性和生物学》一书，基辅，1968，211—221页。

（6）马克思主义经典著作与化学哲学

Ю.А.日丹诺夫：列宁的著作和有机化学的方法论问题，有机化学杂志1970年第6卷第4期，641—654页；列宁的思想对于研究化学方法论问题的意义，哲学科学1970年第2期，80—90页。
Б.М.凯德洛夫：列宁的哲学思想和化学的方法论问题，全苏门捷列夫化学学会杂志1970年第15卷第2期，122—131页；列宁的哲学思想应用于化学史的具体化的实验，自然科学和技术史问题（莫

斯科）1969年第2卷，3—8页。

Ю.С.穆萨别柯夫：深入研究列宁科学遗产的化学方面，见《雅罗斯拉尔工艺学院第21次学术会议》一书，雅罗斯拉尔，1969，205—207页；列宁的思想对化学发展的意义，理论化学与实验化学，1970年第6卷第2期，147—157页。

Ю.С.穆萨别柯夫，А.А.马卡连娅，В.А.波兹迪什娃：列宁论门捷列夫的著作和思想，全苏门捷列夫化学学会杂志1970年第15卷第6期，704—705页。

А.Н.佩特鲁森柯：列宁的哲学思想在化学发展中的作用，乌克兰化学杂志1970年第36卷第4期，307—314页。

Ю.Г.波诺马连柯：恩格斯与化学中时空观的发展，现代自然科学的哲学问题1978年第45期，111—118页。

（7）著名化学家的科学创造和哲学思想

Г.В.倍柯夫：论布特列罗夫的科学地位，哲学问题1955年第6期，110—117页。

Ф.А.杰尔加奇：罗蒙诺索夫的自然科学理论的世界观意义，里沃夫斯克大学学报（化学版）1977年第19卷，61—63页。

Ю.А.日丹诺夫：门捷列夫的科学方法的某些特点，见《哲学与自然科学》一书，莫斯科，1974，225—237页。

А.А.马卡连娅：门捷列夫关于原子价和"化合形式"的观念，化学的历史和方法论问题，列宁格勒，1976，第1卷，24—51页。

Ю.С.穆萨别柯夫：尤斯图斯·李比希创造活动中的方法论问题，雅罗斯拉夫尔工艺学院科学家论丛1971年第27卷，3—10页；伟大化学家的创造活动中的科学史和方法论问题，同上刊物1971年第22卷第1期，3—16页。

Н.И.罗德内，Ю.И.萨拉维也夫：范特-霍夫论化学的发展问题，见《科学学说及其发展》一书，莫斯科，1971，103—116页。

Н.И.罗德内：十九世纪的化学家论化学及其发展问题，见《从十九世纪自然科学家的著作看科学的发展问题》一书，莫斯科，1973，112—165页。

М.В.塔朗丘克：门捷列夫的哲学观点，列宁格勒纺织和轻工业学院实验室论丛，1971，第13卷，3—10页。

М.А.乌拉诺夫斯卡娅：Н.Н.别凯托夫化学著作的哲学意义，哈尔科夫，1961。

С.А.舒卡列夫：门捷列夫的化学观点和《化学原理》，自然科学和技术史问题（莫斯科）1969年第4卷，50—58页。

Р.Б.达布罗金，Л.С.凯洛娃：门捷列夫理论方法的逻辑分析，化学的历史和方法论问题，列宁格勒，1976，第1卷，5—23页。

张 嘉 同

（四）中国研究化学史的概况

科学技术史作为一门独立的学科，正在越来越受到日益广泛的重视。在我国，对于科学技术史的研究历史还较短，只是在新中国成立后才受到了真正的重视。但是相对于我国古代悠久的文化和辉煌的科技成就来说，仍然显得很不相称。

化学史是科学技术史的一个重要组成部分。化学史的研究大致可以分为中国化学史和世界化学史两个部分。中国化学史研究的内容大致包括：古代化学工艺、炼丹术、医

药学中的化学知识、物质组成及物质变化思想、近现代化学在我国的传播和发展，以及化学教育、化学家传记等。世界化学史着重研究和介绍自欧洲文艺复兴运动之后化学的兴起和发展，特别是十九世纪和二十世纪化学的发展，以及现代化学学科同整个自然科学存在的不可分割的联系，等等。

化学史的研究在我国大致可分为三个阶段。1949年新中国成立以前为第一阶段。这时期的一些化学家和历史学家主要是在业余从事化学史研究。队伍不大，研究是分散的。新中国成立后至1976年为第二阶段。化学史研究开始有了专门的人员和机构，队伍发展了，内容丰富了。1977年后为第三阶段，从此开始了转为全面的、系统的、多部门的协同研究。下面依次作一简略回顾。

（1）旧中国时期的化学史研究

在我国古籍文献中，很少有专门记述化学工艺和化学知识的书籍。关于早期工艺制作的发明创造，先秦世本虽有零星记载，但大多是文人学士的只言片语，有的则是不可靠的传说。有些记述与当时的实际情况仍有一定出入，所以对文献的认真考证是首要和必不可少的。文献资料的缺乏，又使得化学史的研究不同于数学史或天文学史，而逐步形成自有特色的一整套方法。这就是它必须将考古发掘、文物分析、模拟实验、土法生产的调研、现存生产中某些传统经验的总结和文献考证结合起来。中国古代化学史研究的发展充分体现了这一研究方法的演进。

世界化学史的研究，一方面要收集、介绍、讨论国外研究的动态、资料和结论，有分析、有批判地继承他们的研究成果；另一方面，也必须努力去掌握和研究在化学发展史中占据重要地位或有重大影响的原始著作，以及反映著名化学家科学思想的原始论文，并用马列主义的基本观点和方法对第一手资料作认真的分析，得出符合历史唯物主义的科学结论。

古代虽有一些化学工艺性质的资料纂辑，而化学史的研究是随着近代化学在中国的传播而逐步开展的。明末清初，传教士曾将欧洲的化学知识传入中国。由于当时欧洲的化学也无太大的成就，传入的并不是科学的化学而是古代化学，所以影响很小。1840年鸦片战争后，在洋务运动的影响下，一些学者翻译出版了一批西方的化学书籍。我国近代化学的启蒙者——徐寿就是其中的代表。1872年之后一批批学习西方科技知识的留学生派出和返回，一些教授近代科技知识的新型学校的相继建立，近代化学知识才陆续传入和传播到中国。就在介绍近代化学知识的同时，近代化学史的一些史实、一些近代著名化学家的业绩及化学史研究的方法也被介绍进来。特别是在1915年，我国第一个综合性科学团体——中国科学社的成立，其中的一些主要成员，如任鸿隽、杨铨、赵元任、胡明复、周仁、竺可桢、王琎、张子高等都认识到要传播科学技术知识，首先要宣传科学技术在社会发展中的重要地位。他们在自己创办的自然科学刊物——《科学》月刊上，连续发表了许多文章[1]-[4]，阐述重视科学和发展科学技术等观点，并在文章中援引了大量的科学史事例。所以他们实际上都是我国科学史研究的倡导者和开拓者。其中，任鸿隽、王琎、周仁和张子高是我国化学史界的老前辈。在他们的带动下，《科学》杂志从第一卷起刊登了不少科技史的文章，其中化学史占据相当的分量。例如《科学》第一卷12期发表了“化学原子发见年次表”。从第二卷到第五卷陆续刊载了任鸿隽撰写的“近代化学家列传”，介绍了拉瓦锡、普利斯特列、卡文迪许等近代著名化学

家。第六卷刊登了高铦铎的"化学年表"，介绍了截止于1919年的化学史大事记[5]-[6]。此外，王琎、吴承洛、曾昭抡、程瀛章和曹元宇等也著译了许多化学史的文章。这些文章在当时是很受欢迎的。

1926年，丁绪贤编写的《化学史通考》一书出版；1936年经修改增补后再版。这是我国第一部化学史专著。它参考了当时美、英的化学史著作，材料丰富，史论结合，受到化学界和教育界的欢迎。不久，一些高等学校一度开设了化学史课，《化学史通考》常被用作教科书或参考书。

西方近代科学技术源源不断地传入我国，一部分人在惊叹西方文明之余，觉得万事不如人，产生了自悲和自卑的心理。面对这一状况，一些爱国的科学家一方面继续学习和传播西方先进的科学技术，同时也开始研究和宣传中国古代的科技成就，以激励人们的爱国热忱和建设家园的民族自信心。特别是在"五四"运动以后，中国科学史的研究开始起步。继天文学史、数学史、医学史之后，化学史的研究也取得了初步的成绩。章鸿钊、王琎首先研究讨论了古代的冶金技术和金属知识。他们发表了一系列文章[7]-[9]，对古铜器、古钱币等文物进行了化学分析。将科学手段和文献考证结合起来，是化学史研究的良好开端。当时参加这方面讨论的还有梁津、曾远荣等学者。梁津1925年在《科学》杂志发表的"周代合金成分考"，最早对《考工记》的"六齐"进行了科学的考查。

1932年，中国化学会成立，这是我国化学发展史上的大事。化学会的许多领导人和会员，如陈裕光、吴承洛、曾昭抡、戴安邦、王琎、丁绪贤、张子高、曹元宇、张资珙、袁翰青和柳大纲等都很重视化学史的研究。1934年，中国化学会创刊的《化学》杂志，连续不断地刊载了化学史的文章。"科学的历史"在该杂志的"中国化学摘要"专栏中一直占据重要的地位。由于中国化学会的成立，化学史的研究有了明显的发展。

这时期参加古代冶金史讨论的，除章鸿钊、王琎外，还有梁树权、张赣南、刘屿霞、陈文熙等。其中刘屿霞的《殷代冶铜术之研究》是通过1929年考古学家对殷墟炼铜遗址的发掘而总结出来的[10]。结合考古发掘的新资料进行研究，这是化学史研究的一个新发展和重要途径。

1921年，王琎对古代酿造技术和制陶技术进行了初步探讨。1932年，他又和柳大纲合作撰文介绍了宜兴的陶瓷发展史[11][12]。这种对保留了古代传统工艺的生产部门进行考察和科学总结的作法，在化学史研究中也是很必要的。1936年，吴仁敬、辛安潮编写的《中国陶瓷史》，基本上是从考古角度来介绍的。同时出版的江思清的《景德镇瓷业史》、黎浩亭的《景德镇陶瓷业概况》，则是侧重介绍实业发展情况，而很少涉及化学。

早在十九世纪末，外国传教士已注意到中国古代的炼丹术，在他们撰写的书籍中，分别介绍了葛洪的《抱朴子》和魏伯阳的《周易参同契》，还明确地指出，中国炼丹术传到阿拉伯后而成为近代化学的最早根源。二十世纪二十年代，王琎、吴承洛等人也提出过上述观点。从1930年起，美国学者戴维斯（T. L. Davis）先后与我国的吴鲁强、赵云从、陈国符合作发表了一系列文章[13]-[15]。这些文章在把中国炼丹术的著作译成英文的同时，还进行了初步的研究，再次肯定了我国炼丹术起源最早。这时期在炼丹术研究中取得较大成绩的学者是曹元宇。他发表的"中国古代金丹家的设备和方法"、

"葛洪之前之金丹史略"等文章[16]，较深入地探索了唐宋时期炼丹家所使用的工具，并提出了一些创见。陈国符作了大量研究后，写出《道藏源流考》一书，1949年由中华书局出版。这是一本研究炼丹术的重要参考书。此外，翁独健编写的《道藏子目引得》也是研究炼丹术的有用工具书。

五行说、阴阳说是我国古代朴素的物质理论的组成部分。三十年代，梁启超和顾颉刚都著文讨论了它们的起源和发展[17][18]。该时期，一些化学家对许多中草药的有效成分进行了分析，这是本草学研究的一个重要内容。与此同时，顾学裘、曾广方、侯祥川等著文介绍了本草学史和本草学的研究状况[19][20]。姚士鳌、劳干等开始了中国造纸史的研究[21][22]。其中，劳干在文章中指出：在蔡伦之前的西汉已有纸张。纸的创造者是漂洗丝棉的劳动妇女，蔡伦乃是造纸术的改良者。

1940年，商务印书馆出版了李乔苹的《中国化学史》一书，这是我国第一本总结中国化学史的专著。在当时的条件下，写成这本书也是很不容易的。此外，彭民一发表了"中国古代的化学"，陈可忠发表了"中国化学发展史"等文章，扼要地介绍了中国古代化学史。这时期，曾昭抡、张子高、袁翰青等人开始了对中国近代化学史的研究[23]-[25]。他们的文章不仅提供了宝贵的线索和资料，也是一个良好的开端。

总之，新中国成立之前，虽然社会动乱，化学史的研究受到很大干扰。但在化学家和历史学家的共同努力下，从内容到方法，还是作了一些开创性的研究，有些成果具有一定水平。

（2）新中国成立后一段时期的化学史研究

新中国的诞生迎来了科学技术史研究的繁荣，化学史的研究也推向了一个新的阶段。1954年8月，中国化学会在北京举办了"中国化学史讨论会"，对几个有关我国化学史的专题进行了热烈的讨论。这时期出版的较重要的著作有袁翰青的《中国化学史论文集》和张子高的《中国化学史稿(古代部分)》。前一部著作，承前启后、深入浅出，有丰富的资料，深入的分析和精辟的评论，有新的见解。后一部著作，较全面地叙述了中国化学史各部分的发展历程，不仅对史料作了严肃的考证，还结合考古和文物的新资料进行了科学分析。这两部著作均具有较高的学术水平，至今仍是研究中国化学史的重要参考书。

这时期还出版了一批有一定水平和影响的化学史专著。例如冯家升的《火药的发明和西传》，杨宽的《中国土法冶铁炼钢技术发展简史》，章鸿钊的《中国古代金属化学及金丹术》，周仁等的《景德镇瓷器的研究》，陈万里的《中国青瓷史略》，景德镇陶瓷研究所编写的《中国瓷器》等。在《中国科学技术发明和科学技术人物论集》和《中国古代科学家》中，也收集了部分化学史的研究成果。

这时期发表的化学史论文，讨论最多的是我国古代冶金史和陶瓷史。这因为考古事业的迅速发展为这两个课题的研究提供了丰富的实物。冶铁史方面，除了对古代冶铁技术作了通俗、系统的简介，对古代某时期、某地区的冶铁技术作了专门的研究之外，还运用金相学和化学分析等科学手段对文物进行了深入地研究[26]-[33]。通过对我国古代冶铁技术的演进、特点和分期的热烈讨论，提出了至迟在战国时期，铁器已开始使用，已经掌握了冶炼生铁的技术，与此同时还使用了多种淬火技术等。这些新观点对历史学和冶金史的研究是很重要的。

对我国古代有色金属冶炼技术的研究较集中地讨论了《考工记》中的"六齐"，虽然看法不完全一致，但对"六齐"及当时合金的配制有了进一步的认识[34]-[37]。此外，王琎通过对古铜钱的继续分析，对有色金属的冶炼和配制，特别是明清时的变迁有了更深的了解。王琴希介绍了古代关于锌和镍的化学。张子高论述了古代的镀锡技术[38]-[40]。

在陶瓷史研究中作了大量工作并取得显著成绩的是周仁、李家治等。从五十年代起，他们应用现代的科研手段，对中国古陶瓷进行了系统的研究[41][42]。他们关于景德镇的古瓷器，特别是明清的名瓷器的研究，表述了我国制瓷工艺的高超水平。他们选用了代表南北系统的青瓷、白瓷和红釉的17个窑场不同时期的古瓷标本，进行分析研究，对从晋至清末的制瓷工艺作了初步总结。他们还对陕西张家坡、安徽屯溪出土的西周陶瓷片进行研究，提出了有关瓷器起源的新认识。他们深入到古窑址和陶瓷工厂进行调查，把古陶瓷的研究与生产联系起来。中国陶瓷史的许多研究成果的取得，与考古文物工作者的努力是分不开的。陈万里等人结合龙泉青瓷、越窑、耀州窑、定窑等古窑址的发掘，对中国陶瓷史作了很好的研究，提供了大量珍贵的资料[43][44]。

由于考古工作者发现了几处西汉残纸，特别是1957年在西安坝桥墓葬中得到的西汉古纸，引起了热烈的讨论。围绕着造纸术的起源和对蔡伦的评价，王明、张德钧、黄天右、袁翰青、张子高、石谷风都发表了各自的看法[45]-[49]。袁翰青提出：纸是我国劳动人民在西汉时期发明的，蔡伦总结了民间造纸的经验，提出了一些技术上的改良。这代表着一种新的看法。

关于中国古代的酿造技术，袁翰青、王琴希、李仰松、曹元宇都著文谈了自己的看法[50]-[53]。他们一致认为用曲造酒是我们祖先的一项极重要的发明。关于古代制糖，吴德铎、吉敦铎发表文章[54][55]，认为我国炼取蔗糖始于唐代。

继袁翰青在《中国化学史论文集》中有四篇论文讨论炼丹术之后，张子高写了"炼丹术的发生与发展"，发表在1960年的《清华大学学报》，他们都明确认为，古代化学工艺的成就是提供炼丹者进行实验的物质基础。

五十年代，世界化学史的研究和介绍，多数内容是有关苏联的化学史实和化学家。例如1954年2月曾举办过纪念门捷列夫诞生120周年座谈会，并出版了有关书籍和刊登一批文章。也有一些文章和书籍介绍过罗蒙诺索夫和布特列洛夫等俄国化学家。

1957年，我国科学史的专门研究机构——中国自然科学史研究室（1975年改为研究所）建立，这对整个科学史的研究，起了推动作用。中国化学会主办的《化学通报》，坚持了过去《化学》杂志的传统，经常刊登化学史的论文和研究动态，促进了化学史的研究。五十年代后期，特别是在十年浩劫期间，曾使科技史的研究受到干扰。尽管如此，解放后二十多年的化学史研究较解放前有了很大进步。这不仅表现在著作和论文的增多，还反映在研究方法的进步和规模的扩大。化学史的研究已从收集、考证、整理古代文献为主的方式过渡到更多地运用现代的科研手段，利用丰富的出土文物的方式来进行深入地研究了。

（3）1977年后的化学史研究

1977年以来，在迅速发展的中外科技文化交流中，许多人急切地感到，必须加强科学技术史的研究。在制定科技政策和科研规划中，许多领导也觉得了解科学技术史和掌握

科学技术发展规律的必要性。在提高教学质量的过程中，许多教师也认识到，增加科技史知识对于改善教学效果很重要。因此，科技史的研究引起了社会上多方面的关注，社会的需求有力地推动了科学技术史研究的迅速发展，从而展现了前所未有的大好形势。在1977年以后的几年中，对于化学史研究，无论是研究的内容、深度，还是研究者的队伍和水平，都较过去有了较大的发展。

北京钢铁学院一些教师组成的中国冶金史编写组，运用多种现代的测试手段分析了许多金属文物，特别对一些有代表性、新近出土的文物进行了研究。他们提出了在我国春秋晚期时块炼铁和生铁几乎同时出现，并在以后又长期共存的新观点。分析和介绍了我国劳动人民创造的多种炼钢工艺（块炼铁渗碳钢、百炼钢、炒钢、铸铁脱碳钢、灌钢）的产生和发展。他们编写的《中国冶金简史》、《中国古代冶金》及发表的许多论文部分地记录了这些研究成果。华觉民等人也作了不少工作，发表了几篇有一定水平的论文[56][57]。他们的研究已不限于冶炼技术，而是进一步论及铸造及整个加工工艺，特别是古代编钟的复制，赢得了国内外学者的好评。

自1976年底以来，中国硅酸盐学会组织了多方面的协作，对中国陶瓷的各个发展阶段及其主要窑址和代表性的古瓷标本，作了广泛的调查研究和理化测试，并于1978年6月、1982年4月先后召开两次全国古陶瓷学术会议。提交会议的100多篇论文，就中国陶瓷器的起源、陶与瓷的区别和联系、原始瓷器的内涵、白瓷与青瓷的关系、青花釉料的来源及窑变的机理展开了深入的讨论。过去被忽视的窑炉、窑具的研究也取得了可喜的成绩。在这些研究成果的指导下，成功地仿制出了许多历史名窑的产品。这对陶瓷科研、生产及中外文化交流都具有重大意义。1982年文物出版社出版的由中国硅酸盐学会主编的《中国陶瓷史》，收集了部分上述研究成果。

考古工作者以许多新的出土文物丰富和促进了中国化学史的研究。除冶金史、陶瓷史外，中国造纸史的研究又是一例。继1957年灞桥出土了西汉古纸后，1977年又在甘肃、陕西发现了西汉古纸。经潘吉星等人对灞桥等古纸进行化验，指出它们都是麻类纤维纸。潘吉星还对西汉造纸术进行了模拟实验，并认为西汉造纸已初具规模。刘仁庆也对西汉古纸进行了研究。刘仁庆的《造纸史话》、潘吉星的《中国造纸史稿》先后于1978年、1979年出版。但有人不同意潘吉星等人的观点，认为出土的西汉古纸还不是真正供书写的纸。一场学术上的争鸣仍在进行。

这几年，中国炼丹术的研究重新引起了重视。张觉人编写的《炼丹术和丹药》，简明地叙述了炼丹术的发展，炼丹和医药的关系，并着重介绍了一些丹药的配制。王奎克、朱晟通过考证和分析，指出我国炼制单质砷比西方早近千年。还提出我国火药的发明导源于炼丹家炼制雄黄的实验[58]。这是一个引起注意的新观点。赵匡华经过研究和实验后指出，我国自古以来，同时兼有镍白铜和砷白铜两种白铜，砷白铜的炼制与金丹术的兴起可以说是同时开始[59]。郭正谊经过认真考证后，指出了冯家升关于火药发明问题上在史料上的错误[60]。此外，孟乃昌等也对炼丹术作了很多研究和实验。

近年来，关于古代物质理论的研究方面，王祖陶通过对我国古代朴素唯物主义思想的分析，提出了我国古代科学思想也有物质和运动守恒的观念[61]。

有关古代食品化学方面，曹元宇、方心芳、罗志腾等著文讨论了我国粮食酒的起源和蒸馏酒出现的年代及我国酿造工艺的特点[62]-[64]。针对有人提出豆腐起源于汉代

的说法，曹元宇、袁翰青再次论述了我国豆腐制作起源于唐末的观点[65]~[66]。

1981年，江苏科技出版社出版的《中国化学史话》，阐述比较全面、精辟，它是曹元宇先生几十年研究中国化学史的心血结晶，不仅是关于中国化学史的专著，也是一本便于广大读者学习化学史的科普读物。中国科学院自然科学史研究所1978年主编的《中国古代科技成就》中，有几篇文章介绍了中国古代化学的成就，受到读者的好评。

近几年来，中国化学史研究所以能取得这些成果，还有一条经验，这就是中国古代化学史的研究必须与考古、文物部门合作，运用现代科研手段，将文献考证、考古发掘、文物分析、传统工艺的调查及模拟实验结合起来，才能使研究深入和较快地取得成绩。这也是目前中国古代化学史研究的特点。

中国近代化学史的研究，近年来有了较快的发展。论述近代化学在我国的传播和发展的文章中，潘吉星著文介绍了“化学”一词的由来。张子高、杨根从我国早期翻译的《化学初阶》、《化学鉴原》两书中，讨论了当时化学名词的制定。袁翰青也介绍了最早译成中文的两部分析化学书籍[67]~[69]。在发展我国化学科学和化学教育中作出贡献的老一辈的化学家，对于他们的业绩和治学方法的研究，也是近代化学史研究的重要内容之一，这几年陆续发表了一些有关的传记文章[70]~[88]。侯德榜、曾昭抡、庄长恭、黄鸣龙、傅鹰、黄子卿、杨石先、王琎、吴宪、赵承嘏、丁绪贤、张子高、范旭东、吴承洛等人在发展我国化学、化工和学术团体的事业中的杰出工作和崇高品德得以称颂。他们的献身事业的可贵精神，严谨的治学作风给人们以很大的激励。

近年来，介绍和研究世界近现代化学史和著名化学家的专著、论文及译作日益增多。这是化学史研究的一个很重要的内容和方向。只有深入地开展对近现代化学史的专题研究，才能逐步加深对化学发展特点和规律的认识。了解近代或当代一些著名化学家的贡献、科学思想、科研方法及科学道德，对于促进我国化学科学和化学教育的繁荣是有积极意义的。过去，这部分内容的研究，相对来说是较薄弱的。现在加强它，完全适应了赶超世界先进科技水平的新形势。北京大学化学系和中国科学院自然科学史研究所化学史组共同编写，由科学出版社1980年出版的《化学发展简史》是这些著作中较全面的一本。这本著作史料丰富，线索清晰，侧重近现代化学史的阐述。尽管书中尚有某些不足或错误，仍不失是高等院校和化学工作者学习和研究化学史的重要参考书。凌永乐编写的《化学元素周期律的形成和发展》、《化学元素的发现》，和其他一些人编写的化学史专著，以及由胡作玄翻译的英国著名化学史家柏廷顿的《化学简史》，由吴忠翻译的美国著名化学史家莱斯特的《化学的历史背景》，都对化学史研究者、化学科学的科研教学人员大有裨益。

我国老一辈的化学家、教育家都很重视化学史教育。早在三十年代，丁绪贤首先在北京大学开设了化学史课，主要讲授世界化学史。五十年代，袁翰青在北京师范大学的化学史课中，又着重介绍了中国化学史。他们的讲课都深受学生们的欢迎。王星拱、陈裕光、曾昭抡、傅鹰等教授，在教学中常讲述化学史的史实，使学生们深受教益。近年来，继北京大学、北京师范学院、华东师范大学、东北师范大学等十多所高等院校化学系开设了化学史课程后，愈来愈多的高等院校开设或正准备开设这门课程。为了配合化学史教学，四川大学和四川绵阳师专的教师还制作出一整套彩色的化学史教学幻灯片，深受欢迎。

1980年，自然辩证法被教育部正式列为研究生和高校学生的必修课或选修课，从而大大推动了自然辩证法（包括化学哲学）的研究和教学。化学史填补了化学哲学与化学科学本身之间颇为特殊的空缺。化学哲学的研究常常不能离开化学史的研究；化学史的研究，特别是思想史的研究又是化学哲学研究的重要前提和基本内容之一。因此从事化学哲学研究和教学的队伍日益成为化学史研究的一股重要力量。近年来，他们发表的论文很多。这些论文有一个显著特点，就是认真对近现代化学史的重大事件和著名化学家的科学思想进行了深入分析，并努力提到哲学高度来认识和概括。本书的许多内容就包括了这方面的部分研究成果。廖正衡、盛根玉编写的《化学辩证法初探》[84]是这种努力的第一次有益的尝试。

工作在不同地方和岗位的化学史研究者的共同努力，以及不同形式的协作，我国的化学史研究、化学史教学必将在新的历史时期取得更大成绩。

本 文 参 考 文 献

〔1〕 任鸿隽："科学与教育"，科学，1（12），1343（1915）；"科学与工业"，科学，1（10），1089（1915）。

〔2〕 杨 铨："战争与科学"，科学，1（4），353（1915）；"科学与商业"，科学，2（4），365（1916）。

〔3〕 赵元任："科学与经历"，科学，1（2），130（1915）。

〔4〕 王 琎："青年与科学发明"，科学，8（7），780（1923）。

〔5〕 任鸿隽："化学原子发见年次表"，科学，1（12），1452（1915）；"近代化学家列传"（共九篇）科学，2（3），325；2（4），457；2（6），703；2（8），936；2（11），1252；3（2），220；3（5），592；4（4），385；5（1），91；（1916—1919）。

〔6〕 高 铦："化学年表"，科学，6（7），693（1921）。

〔7〕 王 琎："中国古代金属化学"，科学，5（6—7），555、672（1920）；"中国制钱之定量分析"，科学，6（11），1173（1921）；"宋钱成分内之铅"，科学，7（8），839（1922）；"五铢钱化学成分及中国古代应用铅、锡、锌镴考"，科学，8（7），839（1923）；"中国黄铜业全盛时代之一斑"，科学，10（4），500（1925）；"中国铜合金内之镍"，科学，13（10），1418（1929）。

〔8〕 章鸿钊："中国铜器、铁器时代沿革考"，科学，6（7），233（1921）；"中国用锌之起源"，科学，8（3），233（1923）；"再述中国用锌之起源"，科学，9（9），1116（1925）。

〔9〕 梁 津："周代合金成分考"，科学，9（10），1261（1925）。

〔10〕 刘屿霞："殷代冶铜术之研究"，安阳发掘报告，（4）（1933）。

〔11〕 王 琎："中国古代酒精发酵业之一斑"，科学，6（3），270（1921）；"中国古代陶业之科学观"，科学，6（8），869（1921）；"宜兴陶业之化学观"，科学，16（2），163（1931）。

〔12〕 王 琎、柳大纲："宜兴陶业之初步观察"，中央研究院化学研究所集刊，第7号（1932）。

〔13〕 吴鲁强、戴维斯："中国炼丹术"，Scientfic Monthly（1930）；《参同契》，Isis（1932）；"抱朴子内篇的金丹和黄白两篇"，美国艺术与科学院院报（1935）。

〔14〕 赵云从、戴维斯："张伯端的悟真篇"，美国艺术与科学院院报（1939）；"金丹正理大全"，美国艺术与科学院院报（1940）。

〔15〕 陈国符、戴维斯："抱朴子内篇的释滞及仙药"，美国艺术与科学院院报（1941）；"介绍陈致虚的金丹大要"，亚洲研究杂志（1942）。

〔16〕 曾元宇："中国古代金丹家的设备和方法"，科学，17（1），31（1933）；"葛洪之前之金丹史略"，学艺，14（1935）。

〔17〕 梁启超："阴阳五行说之来历"，东方杂志，20（10），70（1923）。

〔18〕 顾颉刚："古史辨"第五册，朴社，404（1935）。

〔19〕 顾学裘："中国本草学史略"，科学世界，5，754（1936）。

〔20〕 曾广方："中国本草之科学的研究"，科学的中国，7（7），233（1936）。

〔21〕 姚士鳌："中国造纸术输入欧洲考略"，辅仁学志，1（1），1（1928）。

〔22〕 劳 干："论中国造纸术之原始"，历史语言研究所集刊，（19），489（1948）。

〔23〕 曾昭抡："曾宗巩译之质学课本与其所用化学名词"，化学，2（1），55（1935）；"关于近代中国化学史的一封通讯"，化学通讯，1（13），7（1936）；"江南制造局时代编译之化学书籍及其所用之化学名词"，化学，3（5），746（1936）。

〔24〕 张子高："三十年前吾国科学教育之一斑"，科学，8（4），430（1923）。

〔25〕 袁翰青："中国化学旧闻抄"，化学通讯，2，122（1937）。

〔26〕 李恒德："中国历史上的钢铁冶金技术"，自然科学，1（7），591（1951）。

〔27〕 杨 宽："战国时代的冶铁手工业"，新建设，（6），32（1954）。

〔28〕 孙廷烈："辉县出土的几件铁器底金相学底考察"，考古学报，（2），125（1956）。

〔29〕 华觉民、杨根等："战国两汉铁器金相学考察初步报告"，考古学报，（1），73（1960）。

〔30〕 杨 根："兴隆铁范的科学考查"，文物，（2），20（1960）。

〔31〕 高林生："关于我国早期的冶铁技术方法"，考古，（2），99（1962）。

〔32〕 季志强："历史上的山西制铁"，山西师范学院学报，（1），111（1960）。

〔33〕 曾 庸："汉代铁制工具"，文物，（1），16（1959）。

〔34〕 张子高："六齐别解"，清华大学学报，4（2），159（1958）。

〔35〕 周则岳："试论我国古代冶金史的几个问题"，中南矿冶学院学报，（1），79（1956）。

〔36〕 陈梦家："殷代铜器"，考古学报，7，15（1954）。

〔37〕 杨 根、丁家盈："司母戊大鼎的合金成分及其铸造技术的初步研究"，文物，（12），27（1959）。

〔38〕 王 琎、杨国樑："中国古代铜合金化学成分变迁趋向的一斑"，杭州大学学报，（5），43（1959）；"从明清两代制钱化学成分的研究谈该时期中有色金属冶炼技术在中国发展情况的一斑"，杭州大学学报，（5），51（1959）。

〔39〕 王琴希："我国古代关于锌、镍的化学"，化学通报，（9），569（1955）。

〔40〕 张子高："从镀锡铜器谈鋈字本义"，考古学报，（3），73（1958）。

〔41〕 周 仁："我国传统制瓷工艺述略"，文物参考资料，（2），6（1958）。

〔42〕 周 仁、李家治等："中国历代名窑陶瓷工艺的初步科学总结"，考古学报，（1）89（1960）；《张家坡西周居住遗址陶瓷碎片的研究"，考古，（9）48（1960）。

〔43〕 陈万里："从彩釉方面看我国瓷器的发展"，历史教学，（6），5（1962）；"中国历代烧制瓷器的成就与特点"，文物，（6），26（1963）。

〔44〕 郭 仁："关于青瓷与白瓷的起源"，文物，（6），13（1959）。

〔45〕 袁翰青："造纸在我国的起源和发展"，科学通报，（12），62（1954）。

〔46〕 王 明："蔡伦与中国造纸术的发明"，考古学报，8，213（1955）。

〔47〕 张德钧："关于造纸在我国的发展和起源问题"，科学通报，（10），85（1955）。

〔48〕 张子高："关于蔡伦对造纸术贡献的评价"，清华大学学报，7（2），（1960）。

〔49〕 石谷风："谈宋代以前的造纸术"，文物，（1），（1959）。

〔50〕 王琴希："我国古代造酒的化学工艺"，化学通报，（10），634（1955）。

〔51〕 李仰松："对我国酿酒起源的探讨"，考古，（1），41（1962）。

〔52〕 曾元宇："关于唐代有没有蒸馏酒的问题"，科学史集刊，（6），24（1963）。

〔53〕 方 扬："论我国酿酒当始于龙山文化"，考古，（2），94（1964）。

〔54〕 吉敦谕："糖和蔗糖的制造在中国起于何时"，江汉学报，（9），46（1962）。

〔55〕 吴德铎："关于蔗糖的制造在中国起于何时"，江汉学报，（11），42（1962）。

〔56〕 华觉民："中国古代钢铁技术的特色及其形成"，科技史文集，3，100（1979）；"陨铁、陨铁器和冶铁术的发生"，科技史文集，9，17（1982）；"汉魏高强度铸铁的探讨"，自然科学史研究，1（1），1（1982）。

〔57〕 华觉民、贾云福："先秦编钟设计制作的探讨"，自然科学史研究，2（1），72（1983）。

〔58〕 王奎克、朱晟等："砷的历史在中国"，自然科学史研究，1（2），115（1982）。

〔59〕 赵匡华、阮慎康等："我国金丹术中砷白铜的源流与验证"，自然科学史研究，2（1），24（1983）。

〔60〕 郭正谊："火药发明史料的一点探讨"，化学通报，（6）59（1981）。

〔61〕 王祖陶："中国古代关于物质和运动守恒思想的发展"，自然科学史研究，1（2），97（1982）。

〔62〕 曾元宇："烧酒史料的搜集和分析"，化学通报，（2），68（1979）。

〔63〕 方心芳："曲蘖酿酒的起源和发展"，科技史文集，4，140（1980）。

〔64〕 罗志腾："我国古代的酿酒发酵"，化学通报，（5），57（1978）。

〔65〕 曹元宇："豆腐制造源流考"，中国科技史料，（4），69（1981）。

〔66〕 袁翰青："关于豆腐起源问题"，中国科技史料，（2），84（1981）。

〔67〕 潘吉星："谈'化学'一词在中国和日本的由来"，情报学刊，（1），62（1981）。

〔68〕 张子高、杨根："从《化学初阶》和《化学鉴原》看我国早期翻译的化学书籍的内容和制定的化学名词"，自然科学史研究，1（4），349（1982）。

〔69〕 袁翰青："最早译成中文的两部分析化学书及原作者小传"，化学通报，（2），51（1982）。

〔70〕 王治浩、邢润川："知名学者、化学家曾昭抡教授"，化学通报，（9）47（1980）。

〔71〕 周维善、徐锦文："缅怀著名的有机化学家黄鸣龙教授"，化学通报，（1），54（1980）。

〔72〕 顾惕人、周乃扶："胶体化学和表面化学家傅鹰教授"，化学通报，（7），59（1980）。

〔73〕 肖 勇："傅鹰传略"，中国科技史料，（2），27（1980）。

〔74〕 刘瑞麟，阮慎康：“我国著名的物理化学家黄子卿教授”，化学通报，（11），55（1980）。
〔75〕 杨光伟：“著名化学家、教育家杨石先教授”，化学通报，（12），49（1980）。
〔76〕 王学孝：“杨石先”，中国科技史料，（2），36（1980）。
〔77〕 梁国楔、正棠：“我国化学史和分析化学研究的开拓者——王琎”，化学通报，（9），553(1982)。
〔78〕 刘思职等：“我国生物化学的开拓者——吴宪教授”，化学通报，（4），57（1981）。
〔79〕 高怡生等：“我国中草药化学研究的先驱者——赵承嘏教授”，化学通报，（8）50（1980）。
〔80〕 周昕、杨根、白广美：“优秀教育家、化学史家——张子高教授”，化学通报，（10），46(1980)。
〔81〕 知　峰：“范旭东——我国化学工业的拓荒者”，中国科技史料，（8），2（1980）。
〔82〕 王治浩：“吴承洛与中国化学会”，化学通报，（8），472（1982）。
〔83〕 王治浩：“我国卓越的科学家和教育家——刘树杞教授”，化学通报，（11），56（1981）。
〔84〕 廖正衡、盛根玉：《化学辩证法问题初探》，人民教育出版社（1980）。

周　嘉　华

（五）历届诺贝尔化学奖

爱弗雷·诺贝尔出生在瑞典首都斯德哥尔摩。1841年人小学读书，1842年到俄国。他精通俄、英、法、德多种语文。1848年，诺贝尔从俄国回到瑞典。1850年到美国学习机械。1859年曾获得制造气量计的专利。1847就开始研究炸药，1862年发明了雷管。1864年，他的实验室发生爆炸，一个弟弟和四名助手罹难。他一生曾制成多种炸药，获专利共有255项。他是一位富有科学献身精神的人，终生未娶。1896年12月10日去世，骨灰安葬在斯德哥尔摩市郊。他逝世以后，留下了33233792瑞士克朗的财产。这些财产，根据诺贝尔在逝世前（1895年11月27日）一年签署的遗嘱，全部作为科学奖励基金。他在遗嘱中写道，“我的财产授权于我的遗嘱执行人进行安全可靠的投资，并用它作为一项基金，这项基金的利息每年以奖金的形式分别授于在前一年为人类作出最大贡献的人们。”

根据诺贝尔的遗嘱，奖金发给物理学、化学、生物学、医学和文学及和平事业等五个领域。1968年以后，又增设了经济科学奖。

诺贝尔化学奖从1901年开始颁发，到1983年，已有100位化学家获得了奖金。为了便于查阅，附表如下。

诺　贝　尔　化　学　奖

年代	获奖者（生卒年代，国际）	获奖成果
1901	范霍夫(J.H.Vant Hoff，1852—1919，荷兰)	研究化学热力学，1885—1886年发现化学热力学定律和稀溶液定律
1902	费歇尔（E.Fischer，1852—1919，德）	1890年化学合成中，制出糖及嘌呤衍生物
1903	阿累尼乌斯（S.A.Arrhenius，1859—1927，瑞典）	1889年创立了电离学说
1904	拉姆赛（W.Ramsay，1852—1916，英）	发现惰性气体元素，并确定了零族元素在周期表中的位置，1894年发现氩，1895年发现氦
1905	冯·拜尔（A.Von Baeyer，1835—1917，德）	对有机染料和芳香族化合物的研究，1882年曾合成靛蓝
1906	莫瓦桑（H.Moissan，1852—1907，法）	1886年分离出单质氟，并对氟化物进行了系统研究
1907	布赫纳（E.Buchner，1860—1917，德）	对酶化学的研究，1897年发现酵素
1908	卢瑟福（E.Rutherford，1871—1937，英）	对放射性的研究，1903年提出放射性元素蜕变的理论。
1909	奥斯特瓦尔德（W.Ostwald，1853—1932，德）	对化学平衡和化学反应历程的研究，1901年还曾提出催化理论
1910	瓦拉赫（O.Wallach，1847—1931，德）	对环化物的研究，1895—1905年合成香料
1911	居里夫人（Marie Curie，1867—1934，法，波兰生）	1902年提炼出镭盐，1910年分离出金属镭(第二次获奖)
1912	格林尼亚（V.Grignard，1871—1935，法）	1900年发现格林尼亚试剂

	萨巴蒂尔（P.Sabatier, 1854—1941, 法）	1897—1900年研究有机脱氢催化反应作出贡献
1913	维尔纳（A.Werner, 1866—1919, 瑞士）	1891—1893年提出分子结构配位理论
1914	里查兹（T.W.Richards, 1868—1928, 美）	1913年精确地测定了60多种元素的原子量
1915	威尔斯塔特（R.Willstätter, 1872—1942, 德）	1906年发现叶绿素晶体结构
1916—1917		未颁发
1918	哈伯（F.Haber, 1868—1934, 德）	1909—1913年发明了合成氨的方法
1919		未颁发
1920	能斯特（W.Nernst, 1864—1941, 德）	对化学热力学的研究，1906—1913年提出热力学第三定律
1921	索迪（F.Soddy, 1877—1956, 英）	1910年提出放射性位移定律和同位素假说
1922	阿斯顿（F.W.Aston, 1877—1945, 英）	1919年发明质谱仪，发现多种放射性同位素，并发现了其质量的整数法则
1923	普雷格尔（F.Pregl, 1869—1930, 奥地利）	1910—1913年发明了对有机物进行微量分析的方法
1924		未颁发
1925	席格蒙迪（R.Zsigmondy, 1865—1929, 德）	建立了现代胶体化学的基本方法，对胶体溶液非均匀体系的研究
1926	斯韦德伯格（T.Svedberg, 1884—1971, 瑞典）	对悬浮液和胶体化学的研究，1924年发明超速离心机
1927	韦朗德（H.Wieland, 1877—1957, 德）	1912—1915年胆汁酸及类似物结构的研究，发展了有机化学结构理论
1928	韦道斯（A.Windaus, 1876—1959, 德）	1907年研究了胆固醇的结构，制出维生素D_3
1929	哈登（A.Harden, 1865—1940, 英）	对糖酵解及酶性质的研究，1923年确定了辅酶的结构
	冯·欧勒-歇尔平（H.Von Euler-Chelpin, 1873—1964, 瑞典）	同上
1930	费歇尔（H.Fischer, 1881—1945, 德）	1928—1930年确定了叶绿素和血红素的结构，合成了氯高铁血红素
1931	波希（K.Bosch, 1874—1940, 德）	1913年，改进了合成氨的催化方法
	贝吉乌斯（F.Bergius, 1884—1949, 德）	1920年，用高压法，实现了煤的液化
1932	朗缪尔（I.Langmuir, 1881—1957, 美）	1917年提出了吸附理论，1926年提出形成活化中心的吸附催化假说
1933		未颁发
1934	尤里（H.C.Urey, 1893—, 美）	1932年发现重氢
1935	约里奥-居里（F.Joliot-Curie, 1900—1958 法）	1934年对人造元素的研究
	伊伦·约里奥-居里（Irene, Joliot-Curie, 1897—1956, 法）	同上
1936	德拜（P.J.W.Debye, 1884—1966, 荷兰）	1929年提出极性分子理论，确定了分子的偶极矩，研究了电子的衍射和气体中X射线的性质
1937	哈沃思（W.N.Haworth, 1883—1950, 英）	1933年合成了维生素C
	卡雷（P.Karrer, 1889—1917, 瑞士）	1931年确定了维生素A的结构，1933进行了合成，1935年合成了维生素B_2
1938	库恩（R.Kuhn, 1900—1967, 奥）	1935—1937年研究了胡萝卜素和维生素的结构和性质
1939	鲁茨卡（L.Ruzicka, 1887—, 瑞士）	1920年对聚烯的研究，对高级萜品类研究，合成雄性激素
	布特南德（A.F.J.Butenandt, 1903—, 美）	1932—1939年研究雄性激素，确定其结构，合成该物质
1940—1942		未颁发
1943	赫维西（G. Heveesy, 1885—1966, 匈牙利）	1913—1932年用同位素示踪研究化学过程
1944	哈恩（O.Hahn, 1879—1968, 德）	1939年发现重核裂变
1945	维尔塔南（A.I.Virtanen, 1895—1973, 芬兰）	1920年发明酸化贮存新鲜饲料的方法
1946	萨姆纳（J.B.Sumner, 1887—1955, 美）	1926年发现和制成结晶酶
	斯坦利（W.M.Stanley, 1904—, 美）	1930—1935年制得结晶酶和病毒蛋白酶
	诺斯罗普（J.H.Northrop, 1891—, 美）	同上
1947	鲁宾逊（R.Robinson, 1886—1975, 英）	研究生物碱的结构和其它植物制品，1925年确定吗啡结

		构，1945年确定盘尼西林结构，1946年确定马钱子碱结构
1948	蒂塞留斯 (A.W.K.Tiselius, 1902—1971, 瑞典)	1937年发明电泳法，发现了血清蛋白的复杂性质
1949	吉奥克 (W.F.Giauqus, 1895—, 美)	1928—1939年对化学热力学的研究，超低温下物质性质的研究
1950	迪尔斯 (O.P.H.Diels, 1876—1954, 德)	1928年发现二烯合成的反应，促进了塑料工业发展
	奥尔德 (K.Alder, 1902—1958, 德)	同上
1951	麦克米伦 (E.M.Macmillan, 1907—, 美)	1944—1950年制取超铀元素镅、锔、锫、锎等
	西博格 (G.T.Seaborg, 1912—, 美)	同上
1952	马丁 (A.J.P.Martin, 1910—, 英)	1943年发现色层分析法
	辛格 (R.L.M.Synge, 1914—英)	同上
1953	施陶丁格 (H.Staudinger,1881—1965,德)	对链状高分子化合物的结构和性质的研究
1954	鲍林 (L.C.Pauling, 1901—, 美)	1930年对分子轨道理论及化学键性质的研究
1955	维格那德 (V.du Vigneaud, 1901—, 美)	1953—1954年，合成多肽激素
1956	欣谢伍德 (C. N. Hinshelwood, 1897—1967, 英)	1927年提出分支支链式反应理论，用以说明燃烧爆炸过程
	谢苗诺夫 (N.N.Semenov, 1896—, 苏)	同上
1957	托德 (A.R.Todd, 1907—, 英)	1955年确定核苷酸结构，合成低分子核苷酸，对核辅酶进行了研究
1958	桑格 (F.Sanger, 1918—, 英)	1953年确立胰岛素分子结构
1959	海洛夫斯基 (J.Heyrovsky, 1890—, 捷克)	1926年发明极谱仪
1960	利比 (W.F.Libby, 1908—, 美)	1947年创立用C^{14}确定年代的方法
1961	卡尔文 (M.Calvin, 1911—, 美)	1948—1957年对植物中利用二氧化碳进行光合作用机理的研究
1962	佩鲁茨 (M.F.Perutz, 1914—, 英)	1960年用X光衍射法研究了球蛋白和纤维蛋白的结构
	肯德鲁 (J.C.Kendrew, 1917—, 英)	同上
1963	纳塔 (G.Natta, 1903—, 意大利)	1954年用有机铝及钛的组合催化剂，首次合成了立体定向高分子
	齐格勒 (K.Ziegler, 1898—1973, 德)	同上
1964	霍奇金 (D.C.Hodgkin, 1910—, 英)	1955年确定了维生素B_{12}的分子结构，对青霉素等的化合物进行了研究
1965	伍德沃德 (R.B.Woodward, 1917—1979, 美)	1945—1954年人工合成了奎宁、类固醇、马钱子碱、羊毛甾醇、维生素B_{12}等
1966	密立肯 (R.S.Mulliken, 1896—, 美	1932年用分子轨道理论研究分子中化学键及电子组合状况
1967	艾根 (M.Eigen, 1927—, 德)	1953—1854年对高速化学反应方面的研究
	诺里什 (R.G.Norrish, 1897—, 英)	同上
	波特 (G.Porter, 1920—, 英)	同上
1968	昂萨格 (L.Onsager, 1903—, 美)	1931年建立了不可逆过程的热力学基础
1969	巴顿 (D.H.R.Bartun, 1918—, 英)	1942年发展了分子结构的立体构象分析理论
	哈塞尔 (O.Hassel, 1897—, 挪威)	同上
1970	莱洛依尔 (L.Leloir, 1906—, 阿根廷)	1947年对糖类新陈代谢的研究，并发现了糖核苷酸及其作用
1971	赫兹伯格 (G.Herzberg, 1904—, 加拿大)	1956—1960年对自由基电子排布结构进行了研究，确定了分子光谱分析
1972	穆尔 (S.Moore, 1913—, 美)	1960—1963年测定了核糖核酸酶A分子127个和氨基酸残基排列顺序
	斯坦因 (W.H.Stein, 1911—, 美)	同上
	安芬逊 (C.B.Anfinsen, 1916—, 美)	1945年发现核糖核酸酶，1960—1963年确定RNAseA酶的空间结构
1973	费希尔 (E.O.Fischer, 1918—, 德)	1953年研究了二茂铁的结构，合成了其它金属的二茂化合物
	威尔金森 (G.Wikinson, 1920—, 英)	同上
1974	弗洛里 (P.J.Flory, 1910—, 美)	1953—1969年对高分子物理性质和结构的研究
1975	康福思(J.W. Cornforth,1917—,澳大利亚)	1940—1945年对酶催化反应有机物立体结构的研究
	普雷洛格 (V.Prelog, 1906—, 瑞士)	1950—1960年对有机分子立体结构的研究

1976	利普斯科姆（W. N. Lipscomb, 1919—，美）	1953—1963年对硼烷和碳硼烷结构与性能的研究
1977	普利高津（I.Prigogine, 1917—比利时）	1947年以来对非平衡统计热力学的研究，提出了耗散结构理论和非平衡化学、化学耗散的概念
1978	米切尔（P.Mitchell, 1920—，英）	1961—1966年对生物能转化的研究
1979	布朗（H.Brown, 1912—，美）	1945年发现布朗—维蒂希反应，对磷化物的研究，发现其结构重排
	维蒂希（G.Vithesch, 1897—，德）	同上
1980	P.伯格（P.Berg, 1926—，美）	基因染色体的重建
	F.桑格（F.Sanger, 1918—，英）	DNA核苷酸顺序测定
	W.吉尔伯特（W.Gilbert, 1932—，美）	DNA顺序和基因结构
1981	R.霍夫曼（R.Hoffmann, 1937—，美）	分子轨道对称守恒原理
	福井谦一（1918—，日）	前线轨道理论（边界电子论）
1982	艾伦·克卢格（A.Klug, 1926—，英）	用电子显微镜结合衍射法原理，创立了确定分子聚合体结构的方法
1983	亨利·陶布（H.Taube, 1915—，美）	对金属络合物中电子转移反应机理的研究

王 德 胜

（六）化学发展大事记

古　代

（1）约50万年以前，“北京人”已知利用天然火来获取化学能。

（2）约公元前7000年，中国在新石器时代早期已开始制作陶器。

（3）约公元前5000年，中国在仰韶文化时期制陶技术已较成熟，出现了“彩陶”。

（4）约公元前4000年，埃及人已开始使用金、银、铜、铁等金属。

（5）约公元前3500年，埃及人已开始能够冶炼制铜。

（6）约公元前3000年，埃及人已开始制青铜。

（7）约公元前2500年，埃及人已用砂子和苏打制玻璃。

（8）约公元前2000年，由齐家文化遗址出土的红铜器表明，中国当时已掌握铸铜技术。

（9）约公元前1700年，中国已开始冶铸青铜。

（10）约公元前1600年，据传中国在夏朝时期已有关于物质组成的“五行说”的萌芽。

（11）约公元前1500年，埃及人发现汞。

（12）约公元前1400年，小亚细亚的赫梯人已掌握炼铁（块炼铁）技术。

（13）约公元前1200年前，中国在商朝已釉陶，随后又出现了原始青瓷；已能使用锡、铅、汞的化合物，已有镀锡铜器。

（14）约公元前1100年前，中国的“五行说”已具雏型，形成了最早的朴素的物质观。

（15）约公元前1000年，埃及人已会使用石灰鞣革，并已能制做玻璃器皿。

（16）约公元前800年，中国的周代《易经》已有对石油的记载。

（17）约公元前600年，古希腊哲学家泰勒斯提出“万物之源是水”的学说。

（18）约公元前500年，中国发明了先进的生铁冶炼技术，促进了社会的变革。

（19）约公元前400年，古希腊哲学家恩培多克勒提出“四元素说”。

（20）约公元前400年，古希腊哲学家留基伯提出古代原子论。

（21）约公元前400年，中国思想家墨子提出类似于原子论的“端”说。

（22）约公元前300年，中国战国时期的《周礼·考工记》中载有世界上关于青铜成分冶炼规律的“六齐”规则。

（23）约公元前300年　古希腊哲学家亚里士多德提出“原性说”，认为万物有冷、热、干、湿四种原性，元素是四性结合的表现。

（24）约公元前200年前，中国战国时期的著作《尚书·洪范篇》中已有明文载出“五行说”。

（25）约公元前200年前，中国战国时期的《庄子》有“一尺之棰，日取其半，万世不竭”的物质无限可分思想。

（26）约公元前200年前，中国炼丹术开始萌芽（秦以前以至战国时期）。

（27）约公元前100年前，中国在西汉武帝时代炼丹术已盛行。

（28）约公元前100年前，中国在西汉时代已出现造纸术。

（29）约公元50年，埃及的亚历山大里亚出现“神术”一书，其中载有古老的化学知识。

（30）公元105年，中国东汉时期的蔡伦提高和推广了造纸术。

（31）公元二世纪，中国东汉时期的炼丹家魏伯阳著成《周易参同契》。这是世界上现存的最早的一部炼丹术著作。

（32）公元三世纪，中国东汉末年出现成熟的青瓷，陶瓷技术发展到了新的水平。

（33）公元三世纪，埃及炼金家佐息摩斯在他的著作中已描述了溶解、过滤、蒸馏、升华等化学操作。

（34）公元533—544年，中国人贾思勰的《齐民要术》问世，记载了许多染色、酿酒、造纸等化学知识。

（35）公元七世纪（至九世纪）中国唐代的炼丹著作已清楚表明炼丹家已掌握了黑火药的配制技术。

（36）公元700年，阿拉伯炼金家贾比尔制出硝酸、硫酸、王水，并提出了金属相互转化及四元素相克的思想。

（37）751年，中国造纸术传入阿拉伯，开始西传。

（38）900年，阿拉伯人阿维森纳编著《医典》。

（39）1044年，北宋初年曾公亮等编著的《武经总要》中记载了火药的三种配方。

（40）1092年，中国北宋学者沈括著述的《梦溪笔谈》中记载了化学知识。

（41）1144年，西班牙人译出阿拉伯的炼金著作，欧洲炼金术兴起。

（42）约1200年，〔德〕炼金家马格努斯发现砷。

（43）约十二世纪，阿拉伯出现神秘的“哲人石”之说。

（44）约1250年，〔英〕炼金家罗吉尔·培根著述《炼金术原理》。

（45）约十三世纪中叶前，中国火药传入阿拉伯国家。

（46）约1500年，〔瑞士〕帕拉塞斯提倡医药化学，及万物是由“硫、盐、汞构成”的三元素说。

（47）1556年　〔德〕阿格里柯拉出版《论金属》一书，论述了采矿和冶金技术。

（48）1596年，中国明代药物学家李时珍著成《本草纲目》，载无机药物266种。

（49）1597年，〔德〕李巴维著成第一部化学教科书《炼金术》。

十 七 世 纪

（50）约1600年，〔荷〕海尔蒙特提出“气体”一词。

（51）1637年，中国明代宋应星著成中国农业和手工生产技术的“百科全书”《天工开物》。

（52）1648年，〔德〕格劳贝尔著成《新哲学之炉》一书，其中载有氯化物等知识。

（53）1661年，〔英〕波义耳著《怀疑派化学家》一书，提出科学的元素概念，开始把化学确立为独立的科学。

（54）1669年，〔德〕贝歇尔在《土质物理》一书中，提出物质成分的三“土质”说，是燃素学

说思想的开端。

(55) 1669年，〔英〕梅猷辨别出空气有两种成分。

(56) 1669年，〔德〕波兰德发现磷。

十八世纪

(57) 1703年，〔德〕施塔尔系统提出燃素学说。

(58) 1724年，〔荷〕波伊哈佛提出较新的"化学亲和力"的概念。

(59) 1735年，〔瑞典〕布兰特发现钴。

(60) 1741年，〔英〕武德发现铂。

(61) 约1742年，〔俄〕罗蒙诺索夫论证化学变化中的物质守恒定律。

(62) 1746年，〔英〕罗巴克发明铅室法制硫酸。

(63) 1746年，〔德〕马格拉夫发现锌。

(64) 1749年，马格拉夫从蒸馏蚂蚁中制出蚁酸。

(65) 1750年，〔法〕富朗索瓦首次利用指示剂进行酸碱滴定。

(66) 1753年，〔英〕乔弗里发现铋。

(67) 1754年，〔瑞典〕克隆斯泰特发现镍。

(68) 1755年，〔英〕布拉克指出"固定空气"（二氧化碳）的存在。

(69) 1766年，〔英〕凯文第旭发现氢。

(70) 1769年，〔瑞典〕舍勒发现酒石酸。

(71) 1772年，〔英〕卢瑟福发现氮。

(72) 1773年，〔瑞典〕舍勒发现氧。

(73) 1774年，〔英〕普利斯特利发现氧。

(74) 1774年，〔瑞典〕舍勒发现氯。

(75) 1774年，〔法〕拉瓦锡确立物质守恒定律。

(76) 1775年，〔瑞典〕贝格曼提出化学亲和力的学说。

(77) 1777年，〔法〕拉瓦锡发表《燃烧概论》，提出新燃烧学说，推翻了燃素学说，在化学上实现了一场革命。

(78) 1781年，〔英〕凯文第旭等人相继合成水，否定了水的元素说。

(79) 1781年，拉瓦锡建立碳氢元素的定量方法。

(80) 1782年，〔瑞典〕舍勒发现氰酸。

(81) 1783年，舍勒从油脂皂化中制取甘油。

(82) 1784年，舍勒从柠檬汁中提取出柠檬酸。

(83) 1785年，舍勒从苹果汁中提取出苹果酸。

(84) 1785年，〔法〕贝特罗发现氯的漂白作用。

(85) 1787年，〔法〕拉瓦锡出版《化学命名法》一书。

(86) 1787年，〔法〕拉瓦锡著成《化学大纲》，提出第一个元素分类表。

(87) 1789年，〔德〕克拉普罗特发现铀和锆。

(88) 1790年，〔法〕路布兰发明用食盐制碳酸钠的方法。

(89) 1791年，〔德〕李希特发现当量定律。

(90) 1794年，〔芬〕加德林发现钇。

(91) 1799年，〔法〕普罗斯特确立定比定律。

十 九 世 纪

(92) 1800年，〔意〕伏特发明电堆及电池。

(93) 1800年，〔英〕尼科尔森和卡里斯尔电解水成功。

(94) 1801年，〔英〕哈契特发现铌。

(95) 1802年，〔瑞典〕爱克伯格发现钽。

(96) 1803年，〔英〕道尔顿提出原子论，开辟了化学新时代。

(97) 1803年，〔英〕武拉斯顿发现铑和钯。

(98) 〔德〕拉拉普罗特〔瑞典〕贝采里乌斯等从铈硅石中分离出CeO_2而发现铈。

(99) 1804年，〔英〕道尔顿提出倍比定律。

(100) 1804年，〔英〕合耐特发现锇和铱。

(101) 1807年，〔英〕戴维首次用电解熔盐法制出钠和钾。

(102) 1807年，〔瑞典〕贝采里乌斯对化学基本定律进行了精确证明。

(103) 1808年，〔法〕盖吕萨克发现气体反应体积定律。

(104) 1809年，〔法〕盖吕萨克用氢和氯合成盐酸气。

(105) 1810年，〔英〕戴维确认氯是一种元素。

(106) 1811年，〔法〕库特瓦从海藻灰的母液中发现碘。

(107) 1811年，〔意〕阿佛加特罗提出分子假说。

(108) 1811年，〔瑞典〕贝采里乌斯提出电化"二元学说"。

(109) 1813年，〔瑞典〕贝采里乌斯制订元素符号和化学方程式的书写法。

(110) 1814年，〔法〕盖吕萨克提出含氢的酸的概念。

(111) 1814年，〔瑞典〕贝采里乌斯发表他的第一个精确的原子量表（41种元素）。

(112) 1815年，（普劳特）提出元素由氢原子构成的假说。

(113) 1817年，〔德〕斯特罗迈尔从不纯的氧化锌中发现镉。

(114) 1817年，〔瑞典〕阿尔费德森从叶长石中发现锂。

(115) 1817年，〔英〕戴维发现铂的催化作用。

(116) 1818年，〔瑞典〕贝采里乌斯发现硒。

(117) 1818年，〔德〕米希尔里希提出同晶定律，成为确定原子量的一个依据。

(118) 1819年，〔法〕杜隆和培蒂发现原子热容定律，成为确定原子量的又一个依据。

(119) 1820年，〔法〕帕莱特从金鸡纳树皮中提取奎宁。

(120) 1821年，〔瑞典〕贝采里乌斯确定以氧16做为原子量标准。

(121) 1823年，〔瑞典〕贝采里乌斯从四氯化硅中提出单质硅。

(122) 1823年，〔英〕戴维和法拉弟液化二氧化碳成功。

(123) 1824年，〔法〕盖吕萨克提出容量分析方法。

(124) 1824年，〔德〕李比希在德国的吉森建立了第一个教学用的化学实验室。

(125) 1825年，〔德〕罗威从矿泉水中发现溴。

(126) 1825年，〔英〕法拉第发现苯。

(127) 1825年，〔丹〕艾尔斯泰德还原氧化铝，取得不纯金属铝。

(128) 1827年，〔法〕杜马根据蒸汽密度测定原子量。

(129) 1827年，〔法〕杜特罗页提出渗透质的概念。

(130) 1827年，〔英〕布朗发现布朗运动。

(131) 1827年，〔德〕维勒用金属钾还原氧化钾取得纯铝。

(132) 1828年，〔德〕维勒合成尿素，动摇了有机化学中"生命力"学说。

(133) 1828年，〔瑞典〕贝采里乌斯发现钍。

(134) 1829年，〔德〕德贝莱纳提出"三元素"组，成为研究元素周期律的一个开端。

(135) 1829年，〔德〕罗塞提出和制定了系统定性分析法。

(136) 1830年，〔瑞典〕贝采里乌斯发现同分异构现象。

(137) 1830年，〔德〕李比希把碳氢分析发展成为精确的定量分析技术。

(138) 1831年，〔英〕格雷哈姆发现气体扩散定律。

(139) 1832年，〔德〕李比希和维勒发现安息香酸基，对有机物的"基团说"做了重要发展。

(140) 1833年，〔英〕法拉第发现电解定律。

(141) 1834年，〔法〕杜马系统研究了卤代反应，针对二元学说提出了不同的取代学说。

(142) 1835年，〔瑞典〕贝采里乌斯提出催化和催化剂的概念。

(143) 1835年，〔比〕斯塔司精确测定了许多元素的原子量，否定了普劳特的假说。

(144) 1836年，〔英〕丹尼尔发明了丹尼尔电池（铜锌电池）。

(145) 1836年，〔瑞士〕黑斯提出化学反应的"热总量恒定"定律，即黑斯定律。

(146) 1837年，〔日〕宇田川榕庵编著日本最早的一部化学书《歇密开宗》，把化学称为"歇密"。

(147) 1838年，〔法〕杜马提出化合物的氢氧根可由氟、氯等卤素取代的观点。

(148) 1839年，〔法〕杜马基于有机物的取代作用提出了具有初步结构观念的"类型论"。

(149) 1839年，〔法〕罗朗和日拉尔批判二元说，提出残基学说。

(150) 1840年，〔英〕焦耳发现电转化为热的焦耳定律。

(151) 1840年，〔英〕赫斯发现赫斯定律。

(152) 1840年，〔德〕薛拜因发现臭氧。

(153) 1841年，〔德〕李比希提出植物营养的无机养分说。

(154) 1841年，〔德〕伏累森纽斯发表《定性化学导论》一书，所提出的阳离子分组方案一直沿用至今。

(155) 1842年，〔俄〕齐宁把硝基苯还原为苯胺。

(156) 1842年，〔法〕罗朗和日拉尔初步分辨出原子量、当量和分子量，初步建立了有机物的正确分子概念。

(157) 1843年，〔法〕日拉尔提出有机物同系列的概念。

(158) 1844年，〔俄〕克劳斯发现钌。

(159) 1845年，〔瑞士〕申拜因制出硝化纤维。

(160) 1845年，〔德〕霍夫曼从煤焦油中分离苯。

(161) 1846年，〔法〕罗朗从化学当量和气体密度的测定，证实氧、氮等为双原子分子。

(162) 1847年，〔意〕索勃莱洛发明烈性炸药硝化甘油。

(163) 1848年，〔英〕开尔文（即W·汤姆生）根据卡诺原理提出绝对温标。

(164) 1848年，〔法〕巴斯德发现酒石酸的旋光作用，为立体化学的研究提供了基础。

(165) 1848年，〔英〕开尔文明确绝对温度的概念。

(166) 1849年，〔英〕焦耳提出精确的热功当量，建立了热力学第一定律的牢固基础。

(167) 1850年，〔德〕克劳胥斯发现热力学第二定律，表述为：热量不能从一个较冷的物体自行传递到一个较热的物体。

(168) 1850年，〔法〕威廉米研究浓度和温度对反应速度的影响，开创了化学动力学的定量研究。

(169) 1851年，〔法〕贝特罗用甘油和脂肪酸合成脂肪。

(170) 1852年，〔英〕弗兰克兰受"类型论"的启发初步提出原子价的概念，成为经典价键理

论的开端。

(171) 1853年，〔法〕日拉尔提出有机物基团的四大类型。

(172) 1854年，〔德〕本生研究氯化氢生成的光化反应。

(173) 1855年，〔法〕武兹发现脂肪烃的武兹合成法。

(174) 1855年，中国出版英国人合信所著的《博物新编》一书，中国开始介绍西方近代化学知识，并在1856年出版的《格物探原》一书中开始应用了"化学"一词，一直沿用至今。

(175) 1856年，〔英〕帕金从煤焦油中合成苯胺紫，成为第一个人工合成染料并成为煤焦油加工业的开端。

(176) 1857年，〔德〕凯库勒提出有机物结构的沼气类型，以及碳的4价学说。

(177) 1857年，法国成立法国化学学会。

(178) 1858年，〔德〕凯库勒提出碳原子链状相连的学说，并论证其饱和能力为2n+2。

(179) 1858年，〔意〕坎尼查罗论证阿佛加特罗分子假说，提出原子量的正确测定方法。

(180) 1859年，〔德〕本生和基尔霍夫发明分光分析法，制出第一台用于光谱分析的分光镜。

(181) 1860年，在德国召开国际化学学术会议，确认了由坎尼查罗重新提出的阿佛加特罗分子假说。

(182) 1860年，〔德〕本生用分光镜发现铯，并同基尔霍夫发现铷和铟。

(183) 1860年，〔比〕斯塔司精确证明定比定律，并提出以O=16做为原子量的标准。

(184) 1861年，〔俄〕布特列洛夫提出有机结构理论，强调了化学结构的概念，肯定了分子结构的可知性。

(185) 1862年，〔英〕格雷阿姆提出"胶体"概念，成为胶体化学研究的开端。

(186) 1862年，〔英〕索尔维发明氨碱法。

(187) 1862年，〔德〕维勒从碳化钙制取出乙炔。

(188) 1863年，〔法〕尚古多提出元素排列的《螺旋图》。

(189) 1864年，〔挪〕古德贝格和瓦格发现质量作用定律。

(190) 1865年，〔德〕凯库勒提出苯的环状结构学说。

(191) 1865年，〔德〕克劳胥斯提出熵的概念，奠定了热力学第二定律广泛应用的基础。

(192) 1866年，〔英〕纽兰兹提出"八音律"。

(193) 1867年，〔瑞典〕诺贝尔发明硅藻土（吸收硝化甘油）的炸药。

(194) 1867年，〔德〕克劳胥斯提出"热寂论。"

(195) 1868年，〔英〕帕金从煤焦油中合成出第一个香料香豆素。

(196) 1868年，〔德〕格雷贝和利贝曼从煤焦油中合成出第一个天然染料茜素。

(197) 1868年，〔法〕严森和〔英〕洛克耶从观测太阳光谱中发现氦。

(198) 1868年，德国成立德国化学学会。

(199) 1869年，〔俄〕门捷列夫发现元素周期律，预言了未知元素的存在和性质。

(200) 1869年，〔俄〕迈尔也独立发现了元素周期律。

(201) 1869年，〔德〕霍斯特曼确立最大功和反应热之间的关系，首次把热力学应用于化学。

(202) 1869年，〔美〕海得发明赛璐珞塑料。

(203) 1870年，〔德〕拜尔明确了靛蓝的结构，为近代染料化学奠定了基础。

(204) 1870年，中国翻译出版了第一部化学专著《化学初阶》。

(205) 1871年，〔德〕霍普·赛勒发现转化酶，把蔗糖转化为葡萄糖和果糖。

(206) 1872年，〔美〕巴克兰特合成出第一个热固性塑料酚醛树脂。

(207) 1873年，〔德〕威尔森努斯证明：仅由于原子空间排列的不同就会产生了发酵乳酸和肌肉乳酸的差别。

(208) 1874年，〔荷〕范霍夫发现不对称原子和光学异构体，提出碳原子价键的空间结构学说。

(209) 1874年，中国建近代火药工厂，开始发展中国近代化学工业。

(210) 1875年，〔美〕吉布斯运用热力学理论提出了“化学位”的概念。

(211) 1875年，〔法〕布瓦博德朗发现门捷列夫所预言的镓，证实了元素周期律。

(212) 1875年，〔俄〕马柯尼可夫发现烯烃加成反应的马柯尼可夫的规则。

(213) 1876年，中国学者徐寿等人在上海创办中国第一个科学杂志《格致汇编》，其中载有化学论文。

(214) 1876年，美国建立美国化学学会。

(215) 1877年，〔奥〕玻尔兹曼提出了热力学的几率观点，建立了热力学第二定律的统计力学基础。

(216) 1877年，〔英〕勒克合成酚酞。

(217) 1877年，〔荷〕范德华提出真实气体状态方程式。

(218) 1877年，〔荷〕范霍夫第一次把化学亲和力问题区分为化学平衡和反应速度两个方面。

(219) 1878年，〔德〕拜耳合成靛蓝成功。

(220) 1878年，〔瑞士〕马利纳克发现镱。

(221) 1878年，日本成立日本化学学会。

(222) 1879年，〔挪威〕古德贝格和瓦格以分子碰撞观点得出质量作用定律的普遍表达式。

(223) 1880年，〔瑞士〕马利纳克发现钆。

(224) 1881年，〔法〕法维尔发明铅蓄电池。

(225) 1882年，〔德〕赫尔姆霍茨把化学体系的内能区分为自由能和束缚能两个部分。

(226) 1882年，〔法〕拉乌尔提出稀溶液凝固点降低的报告，提供了测定分子量的新方法。

(227) 1883年，〔德〕艾里希发现偶氮反应。

(228) 1884年，〔法〕勒夏特里提出化学平衡移动原理。

(229) 1884年，〔德〕费歇尔确立糖类的化学结构。

(230) 1885年，〔瑞士〕巴尔麦提出氢原子光谱的波长公式。

(231) 1886年，〔法〕莫瓦桑电解氟氧化钾，首次分离出单质氟。

(232) 1886年，〔德〕温克莱尔发现锗。

(233) 1887年，〔瑞典〕阿累尼乌斯发表《溶质在水中的离解》一文，提出电离学说。

(234) 1887年，〔法〕夏东奈发明人造纤维制造法。

(235) 1887年，〔德〕奥斯特瓦尔德等人创办《物理化学杂志》，标志着物理化学的诞生。

(236) 1888年，〔法〕拉乌尔发表稀溶液蒸汽压降低的拉乌尔定律。

(237) 1889年，〔瑞典〕阿累尼乌斯提出反应速度和温度的关系式及活化能和活化络合物的概念。

(238) 1889年，〔德〕能斯脱从热力学导出浓度和电极电位的关系式，提出了电离溶解压理论。

(239) 1890年，〔德〕费歇尔合成葡萄糖成功。

(240) 1891年，〔德〕能斯脱提出物质的各组分在平衡的两液相中的分配定律。

(241) 1892年，召开捷奈夫国际化学家会议，确定有机化合物系统命名法。

(242) 1893年，〔瑞士〕维尔纳引进副价概念，提出络合物的配位学说，成为研究络合物结构理论的开端。

(243) 1894年，〔英〕瑞利和拉姆赛发现氩、预示了其它惰性元素的存在。

(244) 1895年，〔德〕伦琴发现X射线。

(245) 1895年，〔德〕奥斯特瓦尔德提出催化剂的概念，并提出唯能论，认为"物质仅仅是各种能量的空间集合"。

(246) 1896年，〔法〕贝克勒发现铀的放射性。

(247) 1897年，〔英〕汤姆逊测出电子的荷质比。

(248) 1897年，〔德〕布赫纳发现酵素，开创了酶的研究。

(249) 1897年，〔法〕萨巴梯尔用镍粉催化乙炔和苯的加氢反应，成为有机物氢化催化工业的开端。

(250) 1898年，〔英〕拉姆赛等人发现氖、氪、氙。

(251) 1898年，〔法〕居里夫妇发现钋和镭。

(252) 1899年，〔英〕卢瑟福发现α、β、γ射线。

(253) 1899年，〔德〕费歇尔对蛋白质进行研究，开始进行氨基酸的缩合工作。

(254) 1899年，〔德〕泰莱提出双键反应的余价学说。

二 十 世 纪

(255) 1900年，〔英〕道恩发现氡。

(256) 1900年，〔德〕普朗克提出量子论。

(257) 1900年，〔法〕格林尼亚发现格林尼亚试剂。

(258) 1901年，〔美〕路易斯提出逸度和偏克分子量的概念，扩大了热力学关系式在实际体系中的应用。

(259) 1901年，〔荷〕范霍夫由于发现化学热力学定律和溶液渗透压等贡献获得首届诺贝尔化学奖。

(260) 1902年，〔英〕卢瑟福提出元素蜕变学说，以解释放射性，并破除了元素不变的传统观念。

(261) 1902年，〔德〕费歇尔由于合成糖和嘌呤等物质的贡献而成为第二个诺贝尔化学奖的获得者。

(262) 1903年，〔德〕齐格勒发现超显微镜，证实胶体粒子的存在。

(263) 1903年，〔瑞典〕阿累尼乌斯因提出电离学说（1889年）而获诺贝尔化学奖。

(264) 1904年，〔德〕阿培格从惰性元素的稳定性和周期律中分为8族的事实出发，初步提出"八隅律"。

(265) 1904年，〔英〕拉姆赛由于发现氩气（1894年）等惰性气体而获诺贝尔化学奖。

(266) 1905年，〔美〕玻特伍德提出从铀矿的含铅量及铀的衰变速度来测知地球的年龄。

(267) 1905年，〔德〕拜耳由于合成靛蓝而获诺贝尔化学奖。

(268) 1905年，中国清政府废除科举试办学堂，把化学列为正式课程。

(269) 1906年，〔德〕哈伯等人研究成功合成氨的实验室方法。

(270) 1906年，〔德〕能斯脱提出热力学第三定律。

(271) 1906年，〔德〕费歇尔提出蛋白质的多肽结构，并合成出18肽，成为研究蛋白质结构的开端。

(272) 1906年，〔法〕莫瓦桑由于分离出单质氟（1886年）而获诺贝尔化学奖。

(273) 1906年，〔德〕威尔斯泰德发现叶绿素的晶体结构。

(274) 1907年，〔美〕路易斯提出活度概念。

(275) 1907年，〔德〕布赫纳因发现酵素（1897年）而获诺贝尔化学奖。

(276) 1908年，〔日〕池田菊苗制出味精谷氨酸钠。

(277) 1908年，〔英〕卢瑟福由于提出元素蜕变学说（1903年）而获诺贝尔化学奖。

(278) 1909年，哈伯发表用锇催化剂得到了合成氨的产率为6%，开始跨出了实验室阶段。

(279) 1909年，〔德〕艾里希合成著名药物洒尔弗散六〇六（氨基羟基偶砷苯）。

(280) 1909年，〔德〕奥斯特瓦尔德由于提出催化剂的理论和对化学平衡及化学反应的研究，而获诺贝尔化学奖。

(281) 1909年，〔美〕贝克兰发明酚醛塑料。

(282) 1910年，〔英〕索迪提出同位素的假说，打破了一种元素一种原子的传统观念。

(283) 1910年，〔德〕瓦拉赫由于合成香料和对脂肪族物质的研究而获诺贝尔化学奖。

(284) 1910年，〔日〕铃木梅太郎发现维生素B_1。

(285) 1911年，〔美〕冯克提取和命名维生素。国际化学联合会(International Association of Chemical Societies) 成立。

(286) 1911年，〔波兰〕居里夫人由于镭的研究而获诺贝尔化学奖。

(287) 1911年，〔英〕卢瑟福提出原子模型。

(288) 1912年，〔德〕劳厄进行晶体的X射线衍射实验成功。

(289) 1912年，〔法〕格林尼亚和萨巴蒂尔由于发现格氏试剂（1900年）及对有机脱氢催化反应的研究而获诺贝尔化学奖。

(290) 1913年，〔丹〕玻尔提出旧量子论的原子模型。

(291) 1913年，〔英〕阿斯顿进行同位素分离。

(292) 1913年，〔英〕莫斯莱在X射线的研究中发现原子序数。

(293) 1913年，〔瑞士〕维尔纳因提出配位理论而获诺贝尔化学奖。

(294) 1914年，〔德〕奥斯特瓦尔德建立胶体化学体系。

(295) 1914年，〔美〕理查兹由于精确测定了60多种元素的原子量而获诺贝尔化学奖。

(296) 1915年，〔德〕威尔斯泰德由于发现叶绿素的晶体结构而获诺贝尔化学奖。

(297) 1916年，〔德〕柯塞尔和〔美〕路易斯分别提出了电价理论和共价理论，建立了经典价键理论的电子学说。

(298) 1917年，〔德〕哈恩发现镤。

(299) 1918年，〔英〕沃·路易斯提出化学反应的双分子碰撞理论。

(300) 1918年，〔德〕哈伯由于发明合成氨的方法而获诺贝尔化学奖。

(301) 1919年 〔英〕卢瑟福用α粒子轰击氮转为氧，第一次实现了人工核反应—元素之间的转变，开创了现代"炼金术"的新纪元。

(302) 1919年，〔英〕阿斯顿制成质谱仪，发现同位素的质量近于整数的规律。

(303) 1920年，〔德〕施道丁格提出经缩聚作用而形成高分子链的概念。

(304) 1920年，〔美〕莱梯默提出氢键的概念。

(305) 1920年 〔德〕能斯脱因发现热力学第三定律等而获诺贝尔化学奖。

(306) 1921年，〔丹〕玻尔用原子的电子层结构说明元素周期系。

(307) 1921年，〔英〕索迪由于提出同位素假说（1910年）而获诺贝尔化学奖。

(308) 1922年，〔丹〕勃朗斯泰特提出催化过程形成临界络合物的学说。

(309) 1922年，〔英〕阿斯顿由于发明质谱仪和发现同位素而获诺贝尔化学奖。

(310) 1923年，〔法〕德布洛意提出波粒二象性的假说，为量子力学的建立创造了条件。

(311) 1923年，〔奥〕普雷格尔因发明有机物微量分析法而获诺贝尔化学奖。

(312) 1924年，〔奥〕泡利提出不相容原理，以解释光谱线的反常分裂。

(313) 1925年，〔德〕海森堡提出矩阵力学，成为一种强调可观察量的不连续性的新量子论。

(314) 1925年，〔德〕席格蒙迪由于建立现代胶体化学研究法而获诺贝尔化学奖。

(315) 1926年，〔奥〕薛定锷提出波动力学，把电子看成是一团电荷分布即电子云。

（316）1926年，〔德〕玻恩对薛定谔方程中的波函数提出统计解释。

（317）1926年，〔美〕朗缪尔等提出活化中心的吸附催化理论。

（318）1926年，〔英〕霍沃斯确定五环糖和六环糖两种基本结构。

（319）1926年，〔瑞典〕斯韦德伯格由于发明高速离心机而用于胶体化学的研究，获诺贝尔化学奖。

（320）1927年，〔德〕海特勒和〔美〕伦敦用量子力学处理氢分子取得满意结果，开创了量子化学的研究。

（321）1927年，〔苏〕谢苗诺夫和〔英〕欣谢伍德提出了支链反应理论，用以说明燃烧爆炸过程。

（322）1927年，〔德〕威朗德由于对胆汁酸等结构的研究获诺贝尔化学奖。

（323）1928年，〔英〕弗莱明发现青霉素。

（324）1928年，〔德〕温道斯因胆固醇的研究成果而获诺贝尔的化学奖。

（325）1929年，〔美〕贝特等人提出晶体场理论。

（326）1929年，〔荷〕德拜提出极性分子理论，确定了分子的偶极矩。

（327）1929年，〔美〕吉奥克发现天然氧的三种同位素。

（328）1929年，〔德〕哈登和〔瑞典〕冯·欧勒·歇尔平由于对辅酶的研究而获诺贝尔化学奖。

（329）1930年，〔美〕卡罗瑟经缩合作用合成高分子纤维丝，证实了高分子长链结构的理论。

（330）1930年，〔瑞士〕卡拉确定胡萝卜素的结构。

（331）1930年，〔德〕H·费歇尔由于发现血红素和叶绿素的结构而获诺贝尔化学奖。

（332）1931年，〔美〕鲍林等人研究了多原子分子的共价键，提出了现代化学价键理论。

（333）1931年，〔瑞士〕卡拉确定维生素A的结构。

（334）1931年，〔美〕翁萨格提出不可逆过程的热力学理论。

（335）1931年，〔美〕尤里等人在分离液态氢时发现重氢。

（336）1931年，〔德〕布希和贝吉乌斯由于改进合成氨催化方法和实现煤的液化而获诺贝尔化学奖。

（337）1932年，〔美〕鲍林在解释苯的结构中提出了共振论，认为有些分子的结构是多个价键结构式共振的结果。

（338）1932年，〔美〕密里肯和〔德〕洪特提出了分子轨道理论。根据原子轨道的线性加和的近似计算，对多原子分子开始引用非定位分子轨道概念。

（339）1932年，〔英〕查德威克发现中子。

（340）1932年，〔美〕朗缪尔因提出活化中心的吸附催化学说而获诺贝尔的化学奖。

（341）1932年，中国在南京成立中国化学学会。

（342）1933年，〔英〕霍沃思人工合成维生素C。

（343）1933年，〔德〕多马克发现第一个磺胺药百浪多息。

（344）1934年，〔法〕约里奥居里夫妇用钋的α粒子轰击硼等发现人工放射性，成为人工制造放射性元素的开端。

（345）1934年，〔美〕尤里因发现重氢而获诺贝尔化学奖。

（346）1935年，〔美〕艾林和珀兰尼提出反应速度的过渡态理论的公式。

（347）1935年，〔德〕库恩确定维生素B_2的结构并合成成功。

（348）1935年，〔美〕丹姆斯特用质谱仪发现铀的重要同位素U^{235}。

（349）1935年，〔德〕多马克合成磺胱胺。

（350）1935年，〔法〕约里奥·居里夫妇由于发现人造放射性元素而获诺贝尔化学奖。

（351）1936年，〔苏〕奥巴林发表《生命起源》一书，把探索生命的化学进化提高到一个新水

平。

(352) 1936年，〔荷〕德拜因提出极性分子理论而获诺贝尔的化学奖。

(353) 1937年，〔美〕佩里埃和埃·塞格瑞用氘核轰击钼，人工首次制成周期表的空位元素锝(Z=43)。

(354) 1937年，〔英〕哈沃恩和〔瑞士〕卡雷由于合成出维生素C和研究维生素A的结构等贡献而获诺贝尔化学奖。

(355) 1938年，〔德〕哈恩和斯特拉斯曼用中子轰击铀发现核裂变反应。

(356) 1938年，〔瑞士〕密勒发现杀虫剂D.D.T。

(357) 1938年，〔美〕杜邦公司发现聚氟乙烯，开始了对含氟聚合物的研究。

(358) 1938年，〔美〕库恩由于研究类胡萝卜素和维生素而获诺贝尔化学奖。

(359) 1939年，〔法〕佩雷发现钫。

(360) 1939年，〔中〕侯德榜提出联合制碱法即侯氏制碱法。

(361) 1939年，〔苏〕柯巴捷夫提出催化的活性集团理论。

(362) 1939年，〔瑞士〕鲁茨卡和〔德〕布特南特因激素研究而获诺贝尔化学奖。

(363) 1940年，〔美〕麦克米伦等用热中子照射铀人工制出超铀元素镎(Z=93)。

(364) 1940年，〔美〕西博格用加速的氘核轰击铀，人工制成超铀元素钚(Z=94)。

(365) 1940年，〔美〕埃·赛格勒人工合成周期表的另一空位元素砹(Z=85)。

(366) 1940年，〔美〕卡门用放射性同位素C^{14}进行地质学和考古学的研究。

(367) 1941年，〔美〕马丁发明纸上色层分析法。

(368) 1941年，〔美〕米希尔分离出叶酸。

(369) 1941年，〔美〕伍德沃德合成奎宁。

(370) 1942年，〔美〕费米等人建立原子反应堆。

(371) 1943年，〔英〕马丁和辛格发明分配色层分析法。

(372) 1943年，〔英〕弗洛利分出纯净青霉素用于医药。

(373) 1943年，〔匈〕德赫维希由于用同位素示踪研究化学过程而获诺贝尔的化学奖。

(374) 1944年，〔美〕西博格人工制成镅(Z=95)和锔(Z=96)。

(375) 1944年，〔德〕瓦克斯曼发现链霉素。

(376) 1944年，〔美〕西博格发现96号元素锔。

(377) 1944年，〔德〕哈恩由于发现重核裂变而获诺贝尔化学奖。

(378) 1945年，〔美〕麦克米伦发明电子加速器。

(379) 1945年，〔苏〕礼伏伊斯基发现电子顺磁共振，成为研究自由基的一条重要途径。

(380) 1945年，〔英〕杰·罗伯森用X光结构分析法确定化学键的键长。

(381) 1945年，〔芬兰〕维尔塔南由于发明用酸化贮存新鲜饲料的方法而获诺贝尔化学奖。

(382) 1946年，〔美〕伍德沃德等确定马钱子碱的结构。

(383) 1946年，〔美〕萨姆纳等三人由于对结晶酶研究的贡献而获诺贝尔化学奖。

(384) 1947年，〔美〕格林登尼等人发现61号元素钷。

(385) 1947年，〔美〕利比提出C^{14}测定年代法。

(386) 1947年，〔英〕托德人工合成ADP和ATP。

(387) 1947年，〔英〕鲁宾逊由于研究生物碱的结构和其它植物制品的结构而获诺贝尔化学奖。

(388) 1948年，〔德〕林德纳尔用离子交换树脂分离稀土元素。

(389) 1948年，〔美〕里凯斯从肝脏中分离B_{12}成功。

(390) 1948年，〔美〕巴克赫尔达等人分别发现氯霉素和金霉素等。

(391) 1948年，〔苏〕伏尔肯斯坦提出多相催化的半导体理论。

(392) 1948年，〔瑞典〕蒂塞留斯由于发明电泳法等而获诺贝尔化学奖。

(393) 1949年，〔英〕诺立许和波尔特用脉冲闪光分析法研究10亿分之一秒中发生的超速化学反应。

(394) 1949年，〔美〕吉奥克由于在极低温度状态下的物性研究的贡献而获诺贝尔化学奖。

(395) 1950年，〔美〕西博格等人用α粒子轰击镅和锔制出超铀元素锫（Z=97）和锎（Z=98）。

(396) 1950年，〔美〕鲍林提出蛋白质的α螺旋体结构，并提出"分子疾病"的思想。

(397) 1950年，〔德〕迪尔斯等二人由于发现乙烯的合成反应（1928年）和对塑料研究的贡献而获诺贝尔化学奖。

(398) 1951年，〔英〕基利和波森人工合成出新型结构的化合物二茂铁。

(399) 1951年，〔美〕伍德沃德合成非聚合型的复杂化合物类固醇。

(400) 1951年，〔美〕西博格和麦克米伦由于发现镅、锔、锫、锎等超铀元素而获诺贝尔化学奖。

(401) 1952年，〔英〕欧格耳为解释"夹心型"化合物等而提出络合物的配位场理论。

(402) 1952年，〔美〕吉奥索发现99号元素锿。

(403) 1952年，〔日〕福井谦一发表《芳香烃反应的分子轨道》论文，提出"前线轨道"理论。

(404) 1952年，〔美〕氢弹爆炸试验。

(405) 1952年，〔英〕马丁和辛格由于发明色层分析法（1943年）而获诺贝尔化学奖。

(406) 1953年，〔美〕沃森和〔英〕克里克发现了DNA分子的双螺旋结构，开创了分子生物学的领域。

(407) 1953年，〔美〕杜维格尼奥德合成出第一个蛋白质激素（八肽）。

(408) 1953年，〔德〕施道丁格由于对链状高分子的研究而获诺贝尔化学奖。

(409) 1953年，〔美〕齐格勒用金属有机物催化剂实现常压乙烯聚合。

(410) 1955年，〔美〕吉奥索发现100号元素镄。

(411) 1954年，〔意〕纳塔用齐格勒有机铝和钛的组合催化剂进行立体定向高分子的合成。

(412) 1954年，〔美〕伍德沃德合成马钱子碱、羊毛甾醇、麦角醇等。

(413) 1954年，〔德〕玻恩由于对波函数提出统计解释（1926年）而获诺贝尔物理奖。

(414) 1955年，〔英〕桑格确定了牛胰岛素蛋白质的一级结构（氨基酸的顺序）。

(415) 1955年，〔比〕普里高津从理论上探讨可以存在非阻尼振荡的化学反应。

(416) 1955年，〔美〕西博格用α粒子轰击锿制出超铀元素钔（Z=101）。

(417) 1955年，〔英〕托德确立核苷酸结构并合成出低分子的核苷酸。

(418) 1955年，〔英〕霍琪金确定维生素B_{12}（氰基钴氨）的结构。

(419) 1955年，〔德〕齐古拉发明聚乙烯制法。

(420) 1955年，〔美〕维格纳德由于合成多肽激素而获诺贝尔化学奖。

(421) 1956年，〔美籍华人〕李樵豪确立肾上腺皮质激素分子中的氨基酸顺序。

(422) 1956年，〔美〕伍德沃德合成利血平碱。

(423) 1956年，〔英〕欣谢伍德和〔苏〕谢诺夫因提出支链反应理论（1927年）而获诺贝尔化学奖。

(424) 1957年，〔英〕肯德鲁测定了鲸肌红蛋白的晶体结构。

(425) 1957年，〔英〕托德由于确定核苷酸的结构等而获诺贝尔的化学奖。

(426) 1958年，〔美〕吉奥索和〔苏〕弗略罗夫分别用C和O轰击锔和钚而制出超铀元素锘

(Z=102)。

(427) 1958年，〔德〕穆斯堡尔发现γ射线萤光共振谱。

(428) 1958年，〔英〕桑格由于测定胰岛素的结构而获诺贝尔化学奖。

(429) 1959年，在德国慕尼黑召开的国际化学协会上建议改用C^{12}=12作为原子量的标准。

(430) 1959年，〔苏〕别洛索夫发现丙二酸在铈和铁等催化溴化反应时的化学振荡反应。

(431) 1959年，〔捷〕海洛夫斯基由于发明质谱仪（1926年）而获诺贝尔化学奖。

(432) 1960年，〔美〕伍德沃德等人合成叶绿素成功。

(433) 1960年，〔美〕利比由于创用C^{14}测定年代法（1947年）而获诺贝尔化学奖。

(434) 1961年，〔美〕尼伦贝格破译出第一个生物遗传密码，揭示了核酸分子的碱基序列决定蛋白质分子的氨基酸序列的关系。

(435) 1961年，在加拿大蒙特利尔召开国际化学会议，正式通过采用C^{12}=12作为原子量的新标准。

(436) 1961年，〔美〕吉奥索用硼核轰击锎而制得超铀元素铹（Z=103）。

(437) 1961年，〔美〕卡尔文由于对植物的CO_2光合作用的研究而获诺贝尔化学奖。

(438) 1962年，〔英〕柏莱特合成第一个惰性气体化合物六氟铂酸氙（$XePtF_6$）。

(439) 1962年，〔美〕伍德沃德合成四环素。

(440) 1962年，〔英〕佩鲁茨和肯德鲁由于用X光衍射法研究球蛋白等结构的贡献而获得诺贝尔化学奖。

(441) 1963年，〔意〕纳塔和〔德〕齐格勒由于用金属有机催化剂立体定向合成高分子（1954年）而获得诺贝尔化学奖。

(442) 1963年，〔英〕布切尼兹尔阐明血色素的结构。

(443) 1964年，〔美〕伍德沃德合成河豚毒素。

(444) 1964年，〔英〕霍琪金由于确定维生素B_{12}结构等而获诺贝尔化学奖。

(445) 1964年，中国学者合成胰岛素蛋白质成功。

(446) 1965年，〔美〕伍德沃德和霍夫曼提出分子轨道对称守恒原理。

(447) 1965年，中国科学家第一次实现了具有生物活性的结晶牛胰岛素的人工合成，开辟了人工合成蛋白质的新纪元。

(448) 1965年，〔加〕珀兰尼实现化学能转化为分子振动能，产生了化学激光。

(449) 1965年，〔美〕伍德沃德由于合成奎宁、类固醇等在有机合成方面的贡献而获得诺贝尔化学奖。

(450) 1966年，〔美〕密里肯由于运用分子轨道法研究化学键（1932年）而获得诺贝尔化学奖。

(451) 1967年，〔德〕艾根、〔英〕诺立什和波特三人由于在高速化学反应方面的研究而获诺贝尔化学奖。

(452) 1968年，〔美〕昂萨格由于建立不可逆过程热力学的基础（1931年）而获诺贝尔化学奖。

(453) 1969年，〔英〕巴顿和〔挪威〕哈塞尔由于发展了分子结构的立体构象分析理论而获诺贝尔化学奖。

(454) 1969年，〔美〕吉奥索用碳离子轰击锎制得104号超铀元素。

(455) 1970年，〔阿根廷〕莱洛伊尔由于对糖类的新陈代谢的研究而获诺贝尔化学奖。

(456) 1970年，美国用氮离子轰击锎等制成105号超铀元素。

(457) 1971年，〔加〕莱洛伊尔由于对自由基电子结构的研究和对分子光谱分析法的贡献而获诺贝尔化学奖。

（458）1972年，〔美〕考拉那用模版技术合成出具有77个核苷酸片断的DNA。

（459）1972年，〔美〕伍德沃德合成维生素B_{12}成功。

（460）1972年，〔美〕穆尔、斯坦因和安芬逊三人由于研究核糖核酸酶方面的贡献，而获诺贝尔化学奖。

（461）1973年，〔德〕E.O.费歇尔和〔英〕威尔金逊由于研究二茂铁的结构和合成其它金属的二茂化合物而获诺贝尔化学奖。

（462）1974年，〔美〕弗洛里由于对高分子物理性质与结构进行的研究而获诺贝尔化学奖。

（463）1974年，〔美〕吉奥索以铬离子轰击铅制出106号超铀元素。

（464）1975年，〔澳〕康福思和〔瑞士〕普雷洛格由于对酶催化反应的立体化学和有机分子立体结构的研究，而获诺贝尔化学奖。

（465）1976年，〔美〕利普斯科姆研究氢化硼及其衍生物的结构和组合而获诺贝尔化学奖。

（466）1976年，〔苏〕杜布纳实验室宣布制出107号元素。

（467）1977年，〔比〕普里高津由于自1947年以来对非平衡态热力学，特别是耗散结构理论的研究，获诺贝尔化学奖。

（468）1978年，〔英〕米切尔由于在1961～1966年间对生物能转换的研究而获诺贝尔化学奖。

（469）1979年，中国科学家根据固氮酶活性中心"福州模型"合成出具有一定固氮活性的物质。

（470）1979年，〔美〕布朗和〔德〕维蒂希由于发现磷化物具有重排现象而获诺贝尔化学奖。

（471）1980年，〔美〕伯格、〔英〕桑格和〔美〕吉尔伯特由于发现能用于研究基因结构和控制的方法，而获诺贝尔化学奖。

（472）1981年，中国科学家实现了具有生物活性的酵母丙氨酸tRNA的首次合成。

（473）1981年，〔日〕福井谦一和〔美〕霍夫曼由于提出"前线轨道"等反应过程理论的研究，而获诺贝尔化学奖。

（474）1982年，〔英〕艾伦·克卢格由于结合电子显微镜学和衍射法原理，并以此为基础创造了确定分子聚合体结构的方法，而获诺贝尔化学奖。这一工作对解开癌症之谜具有关键性的作用，

（475）1983年，〔美〕亨利·陶布由于在金属络合物中电子转移反应机理的研究而获诺贝尔化学奖。这一工作将有助于能源方面的研究，

廖 正 衡

编 后 记

本书是由中国自然辩证法研究会化学化工专业组组织编写的。

1979年5月，中国自然辩证法研究会组建了化学专业组筹备小组，负责组织化学辩证法的学术活动，推动化学哲学研究工作的开展，促进自然辩证法工作者和化学工作者加强合作，共同为四化建设服务。专业组于1981年5月在长沙市举办了全国第一次化学辩证法学术讨论会，1983年7月又在长春市和吉林市召开了全国化学化工辩证法学术讨论会。两次会议和其它几次学术会议上，共提出数百篇化学哲学方面的论文。此外，在一些报刊上也发表了不少篇这方面的论文。

1982年10月，在成都召开的全国第二次化学史学术讨论会期间，参加化学辩证法小组的与会代表，建议专业组组织一本化学哲学方面的书稿。经过协商，推选出编辑组，邀请唐敖庆、卢嘉锡、徐光宪三位先生担任主编，并征得科学出版社同意列入出版计划。在主编和研究会领导的关怀、支持下，经过半年多的酝酿和筹备，1983年7月于长春会议期间对有关编写工作作了具体研究和落实。

编委会在收集、阅读了几百篇论文的基础上，反复讨论、研究，编制出全书的初步框架。结合已经发表和撰写的论文，考虑到具体研究课题或方向，分别物色和推荐出有关题目的作者。按照全书框架和成书要求，分别由作者执笔撰写或对已有论文进行修改补充。各部分的初稿，由编委会的同志分工负责审改和统稿，退请执笔人改定清抄后再由几位同志负责全书的统稿定稿，最后结集成这部《化学哲学基础》。

本书第一章“化学哲学概论”，由张嘉同、边克忠同志负责统编；第二章“化学发展的规律性”，由廖正衡同志统编；第三章“化学教育的哲学问题”，由乔世德同志统编；第四章“化学方法论”，由盛根玉同志统编；第五章“现代化学的哲学问题”，由金吾伦、王德胜同志统编。“附录”和“本书重要人名索引”，是由乔世德、王德胜同志负责编辑的。

1984年4月下旬，在武汉大学召开了本书的审稿会议，根据会上提出的许多宝贵意见，经过进一步修改后，又于同年6—7月在山西省召集了统稿定稿会议。全书由张家治、廖正衡、盛根玉三位同志负责统稿，此外，乔世德、王德胜、任定成和王玉生等同志也参加了部分统稿工作。书稿的审、改、统、定过程中，三位主编曾给予许多宝贵的指教。

目前，国内尚未见到类似的著作，本书的编写也只是个尝试。由于全书内容是51位作者分头执笔的，观点不可能、也不必要完全一致，风格、深度及衔接上亦有所参差，因此难免在一定程度上留有论文集的痕迹。我们期望本书能为我国化学哲学的发展和逐步成熟作些准备工作，书中的错漏和不当之处，尚祈专家和读者予以批评指正，以便编辑组和执笔人今后修改、补充，深入研究。

值此《化学哲学基础》与广大读者见面之际，我们对中国自然辩证法研究会领导的关怀与指导深表感谢和敬意。并感谢武汉大学、山西大学和湖北、山西两省自然辩证法研究会给予的热情帮助，感谢各位作者所在单位给予的大力支持。

《化学哲学基础》编委会

1984年7月

本书重要人名索引

D

E

F

G

T

V

W

Z

Б

З

К

Л

М